

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES

COMME EXIGENCE PARTIELLE
DE LA MAÎTRISE ES SCIENCES (PHYSIQUE)

PAR
ÉMILIE GUAY

TRAJECTOIRES BOHMIENNES ET INTERFÉRENCE

AVRIL 2004

Université du Québec à Trois-Rivières

Service de la bibliothèque

Avertissement

L'auteur de ce mémoire ou de cette thèse a autorisé l'Université du Québec à Trois-Rivières à diffuser, à des fins non lucratives, une copie de son mémoire ou de sa thèse.

Cette diffusion n'entraîne pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits de propriété intellectuelle, incluant le droit d'auteur, sur ce mémoire ou cette thèse. Notamment, la reproduction ou la publication de la totalité ou d'une partie importante de ce mémoire ou de cette thèse requiert son autorisation.

Résumé

L'interprétation de Bohm de la mécanique quantique possède cette caractéristique essentielle de reproduire exactement les prédictions de l'interprétation standard de la même théorie. En donnant aux objets quantiques une nature corpusculaire, une position et une quantité de mouvement bien définies en tout temps, Bohm a pu réintroduire le concept de trajectoire, que l'on appellera bohmienne, en mécanique quantique. Tout cela fait que l'interprétation de Bohm est déterministe. Ainsi, il pourrait être possible, en connaissant toutes les conditions initiales, de faire des prédictions sur le résultat d'une mesure faite sur un système individuel. Or, le principe d'incertitude d'Heisenberg prévaut toujours et empêche la mesure de quantités conjuguées sans modification de l'état du système. Il est donc impossible de savoir à l'avance quelle trajectoire sera empruntée par le système étudié.

La mécanique quantique bohmienne nous offre une version beaucoup plus intuitive des phénomènes à l'échelle microscopique. C'est ainsi qu'elle peut expliquer les mécanismes internes régissant l'interférence d'une seule particule. Le potentiel quantique, qui est unique à l'interprétation de Bohm, contraint les particules à suivre des trajectoires qui donneront naissance aux patrons d'interférence. Ce phénomène est resté très longtemps mal compris, la mécanique quantique standard n'en donnant qu'une simple description.

Même si les interprétations standard et bohmienne de la mécanique quantique sont reconnues pour faire les mêmes prédictions, il a été proposé qu'elles ne s'accorderaient pas sur l'interférence de deux particules identiques. Cette proposition a reçu plusieurs critiques. Nous avons donc calculé les trajectoires bohmiennes pour ce phénomène. Les

trajectoires obtenues et le calcul de l'écart-type du centre de masse d'une paire nous ont permis de montrer que l'interférence de deux particules ne cause pas de discordance entre les deux interprétations.

Par la suite, nous avons cherché une méthode numérique efficace pour obtenir la fonction d'onde et les trajectoires bohmiennes pour l'interférence d'une seule et de deux particules identiques. Bien qu'une approche basée sur les équations bohmiennes du mouvement utilisant la méthode généralisée des moindres carrés pour évaluer les dérivées spatiales ait semblé prometteuse, elle s'est révélée inefficace dans le cas de l'interférence, que ce soit avec une grille mobile ou fixe. Toutefois, de très bons résultats ont été obtenus en résolvant l'équation de Schrödinger pour les parties réelle et imaginaire de la fonction d'onde pour les deux types d'interférence. Une approximation à 5 et 6 points a servi à estimer les dérivées spatiales nécessaires.

Remerciements

J'aimerais tout d'abord souligner tout le soutien que j'ai reçu de la part de mes parents, de mon frère et de ma soeur tout au long de mes études. Je remercie Philippe, mon conjoint, pour m'avoir aidée à passer à travers les moments plus difficiles et pour m'avoir toujours encouragée à continuer. C'est grâce à eux que j'ai su persévérer jusqu'aux études graduées.

Merci aussi à mon directeur de recherche, Louis Marchildon, pour son appui et sa disponibilité, ainsi que d'avoir toujours su trouver les mots qui m'ont permis d'avancer. Son soutien et ses conseils ont été des facteurs déterminants dans ma réussite.

Je tiens à remercier le CRSNG pour l'octroi d'une bourse d'études, ce qui m'a permis d'éviter les soucis d'ordre financier et de pouvoir me concentrer sur mes études.

À mes parents, mon frère, ma soeur et Philippe.

Table des matières

Résumé	i
Remerciements	iii
Table des matières	iv
1 Introduction	1
2 Mécanique bohmiennne et interférence	8
2.1 Interprétation de Bohm	8
2.2 Interférence d'une seule particule	12
3 Interférence de deux particules	22
3.1 Prédiction des deux interprétations	26
3.2 Trajectoires	32
4 Fonctions d'onde générales	35
4.1 Calcul des dérivées	37
4.1.1 Méthode généralisée des moindres carrés	38
4.1.2 Approximation à quelques points	43
4.2 Méthodes de résolution numérique	45
4.2.1 Équations bohmiennes du mouvement	45
4.2.2 Propagation de l'équation de Schrödinger	52
4.3 Résultats	57

TABLE DES MATIÈRES

v

4.3.1	Équations bohmiennes du mouvement	58
4.3.2	Propagation de l'équation de Schrödinger	65
4.4	Discussion	69
5	Conclusion	71
	Bibliographie	73

Chapitre 1

Introduction

Malgré les innombrables succès de la mécanique quantique dans la vérification expérimentale de ses prédictions, une question de taille n'est toujours pas réglée dans cette théorie : celle de son interprétation. En effet, bien que le formalisme mathématique soit très largement accepté, plusieurs problèmes surviennent lorsque l'on tente de faire le lien entre la fonction d'onde et le système réel qu'elle représente.

Pour mieux comprendre cette problématique, il est utile d'examiner un peu plus l'interprétation la plus répandue, celle de Copenhague¹. Elle fut développée, entre autres, par Niels Bohr au tout début de la mécanique quantique. Dans cette interprétation, les objets quantiques, ou microobjets, sont soumis à une dualité onde-corpuscule. Leur comportement se décrit soit comme celui d'une onde, soit comme celui d'un corpuscule, mais jamais les deux en même temps. Il existe donc, selon l'interprétation de Copenhague, une certaine complémentarité entre ces deux caractères des objets quantiques. Jusqu'ici, il n'y a rien de vraiment alarmant. Bien que l'on puisse difficilement visualiser les objets quantiques, il est possible d'accepter qu'ils aient une telle nature. L'endroit où le bât blesse se retrouve plutôt dans le type de prédictions que peut faire la mécanique quantique standard. Effectivement, il n'est généralement pas possible de prédire exactement la valeur obtenue lors de la mesure d'une certaine quantité sur un système individuel. Les prédictions ne peuvent être que statistiques. Cela signifie que l'on ne

1. Parfois nommée interprétation standard ou mécanique quantique standard.

peut connaître que les valeurs qui peuvent être obtenues et la fréquence avec laquelle elles le seront. Cette information est obtenue soit avec l'équation de Schrödinger pour les cas non relativistes ou avec celle de Dirac, dans les cas relativistes. Ce caractère intrinsèque des probabilités a été proposé par Max Born très tôt durant les premières années de la mécanique quantique. L'interprétation de Copenhague souffre ainsi d'un mal que l'on peut nommer l'indéterminisme statistique. La fonction d'onde contient donc toute l'information pouvant être obtenue sur les prédictions statistiques des mesures que l'on peut effectuer sur un système physique.

Ce caractère bien particulier a valu à la mécanique quantique standard de nombreuses critiques venant de ceux qui croyaient que le but de la physique était de donner une description déterministe de la réalité. On taxa donc l'interprétation de Copenhague d'incomplète. La critique sans aucun doute la plus célèbre est celle d'Einstein, Podolsky et Rosen, publiée en 1935 dans le *Physical Review*[1]. On y présentait une expérience de pensée que l'on nomme aujourd'hui *paradoxe EPR*. Les auteurs argumentaient à l'aide de trois hypothèses. La première était liée à la complétude des prédictions de la mécanique quantique standard, la deuxième portait sur la localité (aucune influence ne se propage plus vite que la lumière) et la dernière portait sur la façon dont les éléments de réalité physique peuvent être accordés aux prédictions. À la fin de leur argumentation, Einstein, Podolsky et Rosen arrivent à la conclusion que les trois hypothèses ne peuvent être toutes vraies en même temps et que la première devait être fausse. Ils suggérèrent donc l'existence de *paramètres cachés*, i.e. absents de la mécanique quantique standard, permettant d'obtenir une version déterministe de la mécanique quantique.

Malgré la réplique de Bohr [2] à l'article d'Einstein, Podolsky et Rosen, il fallut attendre en 1964 pour qu'un test expérimental ne soit suggéré pour vérifier les hypothèses d'Einstein, Podolsky et Rosen. Cette année-là, J. S. Bell publia un article [3] très intéressant dans lequel il vérifie mathématiquement de quelle façon l'expérience pourrait trancher le paradoxe EPR. En postulant l'existence de paramètres cachés locaux, il obtient ce que l'on appelle maintenant les inégalités de Bell. L'expérience envisagée est réalisée à l'aide de paires de particules fortement corrélées. Si les inégalités sont vio-

lées, alors seuls des paramètres cachés non locaux peuvent être ajoutés à la mécanique quantique standard sans modifier ses prédictions. Pour tous ceux qui sont familiers avec la théorie de la relativité restreinte, un tel problème peut sembler insurmontable. En effet, une telle non-localité peut permettre des transferts d'énergie à des vitesses plus grandes que celle de la lumière.

Ce fut beaucoup plus tard, soit en 1981-1982, que les premiers tests indiscutables des inégalités de Bell furent réalisés par Aspect, Grangier, Dalibard et Roger [4, 5, 6]. L'expérience trancha finalement en faveur de la mécanique quantique standard.

Il ne faut pas croire que la mécanique quantique standard sortit de cette lutte intacte. L'étude de phénomènes impliquant des paires de particules corrélées montra que cette interprétation est non séparable. Cela signifie qu'il ne fait pas de sens de parler d'un système composé d'une paire de particules corrélées en termes de ses parties, donc de chacune des particules. Malgré ce fait, il n'est pas possible de transmettre de l'information plus vite que la lumière grâce à cette caractéristique [7, 8]. La mécanique quantique standard est donc parfaitement en accord avec la relativité restreinte.

Le résultat obtenu par Aspect, Grangier, Dalibard et Roger [4, 5, 6] a mis à mal la possibilité d'obtenir un jour une description déterministe de la réalité au niveau quantique. Plusieurs y renoncèrent : comment croire en une interprétation de la réalité qui permettrait l'échange d'énergie ou du moins d'influence plus vite que la vitesse de la lumière, alors que cela est strictement interdit par la relativité restreinte ? Quelques-uns gardèrent toutefois espoir. En 1952, David Bohm proposa une théorie avec paramètres cachés [9]. Cette interprétation offre beaucoup de possibilités, surtout parce qu'elle reproduit exactement les prédictions de la mécanique quantique standard. Les détails de cette théorie sont donnés à la section 2.1. L'une de ses réalisations est d'avoir réussi à expliquer le phénomène de l'interférence d'une seule particule avec le concept de corpuscule. Cela ne semble plus du tout anodin lorsque l'on se rappelle que plusieurs physiciens doutèrent de la possibilité d'expliquer ce phénomène. Citons par exemple Richard Feynman [10] : "On peut se demander comment ça (l'interférence) marche. Quel est le mécanisme à l'oeuvre en réalité ? Personne ne connaît aucun mécanisme. Personne

ne peut vous donner de ce phénomène une explication plus profonde que la mienne – c’est-à-dire une simple description.” La section 2.2 présente de quelle façon la mécanique quantique bohmienne permet d’expliquer l’interférence.

Une des principales caractéristiques de l’interprétation de Bohm réside dans la nature qu’elle donne aux objets quantiques : ce sont des corpuscules. Un nouveau potentiel est introduit et que l’on nomme *potentiel quantique* pour le différencier du potentiel V utilisé en mécanique quantique. C’est lui qui permet aux particules d’avoir parfois un comportement ondulatoire. Nous avons vu précédemment qu’une théorie avec variables cachés, pour pouvoir faire les mêmes prédictions que la mécanique quantique standard, doit comporter au moins un élément non local. Ici, cet élément est le potentiel quantique. À cause de cela, l’interprétation de Bohm n’est valide que dans le domaine non relativiste lorsque l’équation de Schrödinger est utilisée.

Un autre fait marquant de la mécanique quantique bohmienne est la réintroduction du concept de la trajectoire. Effectivement, ici, les particules quantiques ont une position et une quantité de mouvement bien définies toutes les deux en mêmes temps. Cependant, pour respecter le principe d’incertitude d’Heisenberg, les trajectoires ne peuvent être connues à l’avance. Cela contraste avec l’interprétation de Copenhague où deux quantités conjuguées ne peuvent être bien définies en même temps et donc où les trajectoires sont absentes². Le fait que les trajectoires existent permet à l’interprétation de Bohm d’être déterministe. Toutefois, il n’est pas possible de faire mieux que les prédictions statistiques de l’interprétation standard. La raison de ce fait est simplement que les valeurs initiales de position et de quantité de mouvement d’un système individuel ne sont pas connues plus précisément que ne le permet le principe d’incertitude. Comme les conditions initiales ne peuvent pas être connues exactement, il n’est pas possible de connaître leur valeur finale. Dans certains cas, il est possible de trouver quelle trajectoire a été empruntée par une particule lorsque l’on mesure son point d’arrivée. Cela est en grande partie dû au fait que les trajectoires bohmiennes ne peuvent pas se

2. Notons que l’interprétation de Bohm, tout comme l’interprétation standard avec l’équation de Schrödinger, ne s’attache pas au traitement du rayonnement dû à l’accélération des particules chargées.

croiser dans l'espace de configuration, à cause de l'unicité de la solution.

La raison pour laquelle les versions standard et bohmienne de la mécanique quantique font les mêmes prédictions statistiques est très simple : dans les deux cas, la distribution de probabilité est donnée par la même expression mathématique. Malgré cette ressemblance, il existe une différence fondamentale entre l'importance que donnent les deux interprétations à la fonction d'onde. Dans l'interprétation de Bohm, la fonction d'onde n'est qu'un artifice mathématique permettant d'obtenir les véritables équations du mouvement, alors que dans l'interprétation standard, la fonction d'onde donne toute l'information possible sur un système physique.

Malgré la correspondance entre les prédictions des deux interprétations, des chercheurs tentent de trouver une expérience qui permettrait de les distinguer. Récemment, trois chercheurs, Ghose [11] et, indépendamment, Golshani et Akhavan [12, 13, 14], ont proposé plusieurs expériences similaires qui, selon eux, atteindraient théoriquement ce but. Le phénomène proposé est l'interférence de deux particules identiques qui est obtenue avec des paires d'électrons corrélées et des interféromètres symétriques à deux ou à quatre fentes. La réalisation expérimentale de leurs propositions a été faite par Brida, Cagliero, Falzetta, Genovese, Gramegna et Novero [15] à l'aide de photons.³

La différence entre les deux interprétations viendrait, selon eux, du fait que l'interprétation standard permet à une paire de particules d'atteindre le détecteur ou l'écran en des positions asymétriques par rapport à l'axe des x , alors que ce comportement serait interdit dans la mécanique quantique bohmienne. Ces conclusions ont été critiquées notamment par Struyve, De Baere, De Neve et De Weirdt [16], ainsi que par Marchildon et l'auteur de ce travail [17, 18]. Seule l'utilisation d'hypothèses erronées quant à la distribution initiale de la position des paires de particules causerait une différence entre les deux versions de la mécanique quantique.

Afin de vérifier la distribution des trajectoires bohmiennes pour les expériences

3. Pour considérer que cette expérience est un test de la proposition de Ghose, Golshani et Akhavan, il faut faire l'hypothèse que les trajectoires des photons s'apparentent, pour les caractéristiques essentielles de cette expérience, à celles d'électrons.

mentionnées plus haut, les équations bohmiennes du mouvement ont été développées pour les dispositifs à deux et à quatre fentes. À partir de ces équations, il a été possible de démontrer que le cas du dispositif à quatre fentes se réduit à celui à deux fentes. Afin d'obtenir les trajectoires, les équations du mouvement pour le dispositif à deux fentes ont donc été résolues numériquement. Ces résultats montrèrent qu'il n'est pas interdit dans l'interprétation de Bohm que les particules d'une même paire atteignent l'écran en des positions asymétriques. Les propositions de Ghose, Golshani et Akhavan ont donc été invalidées. De plus, l'erreur qui a été commise face aux positions initiales a été très simplement mise en lumière par le calcul de l'écart-type de la position du centre de masse d'une paire.

Il n'est pas nécessaire de dire l'importance que peut avoir le développement de méthodes de résolution numérique permettant d'obtenir la fonction d'onde lorsqu'une solution exacte de l'équation de Schrödinger n'est pas possible. Le nombre très restreint de solutions analytiques et l'augmentation des applications de la mécanique quantique sont des arguments puissants pour justifier tout travail dans ce sens. Deux approches sont considérées lorsque l'on souhaite obtenir la propagation dans le temps d'une fonction d'onde. La première consiste à résoudre numériquement l'équation de Schrödinger à l'aide, par exemple, des éléments finis. La seconde approche concerne la version dite "hydrodynamique" de la mécanique quantique. Les équations résolues dans cette version sont en fait les équations du mouvement de l'interprétation de Bohm. Malgré ce fait, il n'est pas nécessaire d'adhérer à la mécanique quantique bohmienne pour pouvoir utiliser cette approche. Les trajectoires bohmiennes peuvent être considérées uniquement comme des artifices de calcul permettant d'obtenir la fonction d'onde.

Une fois que le choix des équations différentielles à résoudre est fait, il reste encore la question de la méthode numérique à utiliser. L'équation de Schrödinger ne peut être solutionnée qu'avec une résolution d'Euler, alors que les équations du mouvement de Bohm peuvent l'être avec une approche d'Euler ou de Lagrange. La différence entre les deux types de résolution et leurs caractéristiques seront explicitées au chapitre 4.

Un autre choix crucial reste à faire, celui de la méthode d'approximation des dérivées.

Comme nous le verrons plus loin, il est nécessaire de connaître les dérivées spatiales d'ordre 1 et 2 de certaines quantités afin de pouvoir effectuer les divers calculs. De plus, la manière de calculer les différentes dérivées s'est révélée être un élément très important dans l'efficacité des méthodes.

Des essais avec les équations bohmiennes du mouvement ont été faits avec la technique d'Euler et celle de Lagrange⁴ avec la méthode généralisée des moindres carrés pour évaluer les dérivées. Dans les deux cas, cette approche s'est révélée être inefficace dans le cas de l'interférence. Toutefois, la résolution de l'équation de Schrödinger avec une approximation à cinq ou six points pour le calcul des dérivées a permis d'obtenir des résultats satisfaisants pour l'interférence d'une seule et de deux particules identiques.

4. Cette méthode est tirée de l'article de Lopreore et Wyatt [19].

Chapitre 2

Mécanique bohmienne et interférence d'une seule particule

2.1 Interprétation de Bohm

Proposée en 1952 par David Bohm [9], l'interprétation de la mécanique quantique portant le même nom permet une description déterministe des phénomènes au niveau microscopique. Elle entre dans la catégorie des théories avec paramètres cachés. Cela signifie que certains éléments absents de la formulation standard de la mécanique quantique y sont introduits dans le but de la compléter. Dans le cas de l'interprétation de Bohm, on attribue aux objets quantiques une position et une quantité de mouvement bien définies en tout temps. Ces deux quantités sont conjuguées, c'est-à-dire que dans la mécanique quantique standard, elles ne sont pas bien définies toutes les deux en même temps. C'est donc en raison de ceci que ces quantités sont considérées comme des paramètres cachés.

En plus d'opter pour une nature corpusculaire pour les objets quantiques et d'introduire le concept de trajectoire dans la mécanique quantique, l'interprétation de Bohm possède cette caractéristique essentielle de reproduire exactement les prédictions de la mécanique quantique standard. Cependant, à cause des inégalités de Bell, pour avoir

une telle description en fonction de paramètres cachés et obtenir les mêmes prédictions que l'interprétation standard, il faut avoir recours à un élément non local. C'est là qu'intervient le potentiel quantique. Cette non-localité est même nécessaire pour expliquer certains phénomènes à plusieurs particules.

Malgré la nature déterministe de cette interprétation, il n'est toujours pas possible de prédire le résultat d'une mesure prise sur un système individuel. Pour ce faire, il nous faudrait connaître initialement les propriétés du système étudié pour prédire le résultat exact d'une mesure prise plus tard. Or, la connaissance de toutes les propriétés nécessaires, comme par exemple la position et la quantité de mouvement, est impossible à obtenir sans modifier l'état de la particule, sa fonction d'onde et donc, comme nous le verrons, le potentiel quantique. On ne peut donc faire mieux que des prédictions statistiques.

Pour dériver les équations de base de l'interprétation de Bohm, posons tout d'abord:

$$\psi(x,t) = R(x,t) \exp(iS(x,t)/\hbar), \quad (2.1)$$

où les fonctions $R(x,t)$ et $S(x,t)$ sont réelles. Ensuite, on remplace cette expression dans l'équation de Schrödinger dépendant du temps:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x)\psi. \quad (2.2)$$

On obtient ainsi

$$\begin{aligned} i\hbar \exp(iS(x,t)/\hbar) \left(\frac{\partial R}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} R \frac{\partial S}{\partial t} \right) \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \cdot \left[\exp(iS(x,t)/\hbar) \left(\vec{\nabla}(R) + \frac{i}{\hbar} R \vec{\nabla} S \right) \right] \\ + V(x) R \exp(iS(x,t)/\hbar). \end{aligned}$$

Pour simplifier les équations, éliminons les exponentielles des deux côtés de l'équation:

$$\begin{aligned} i\hbar \left(\frac{\partial R}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} R \frac{\partial S}{\partial t} \right) = & -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla^2(R) + 2\frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} R \cdot \vec{\nabla} S \right. \\ & \left. + \frac{i}{\hbar} R \nabla^2(S) - \frac{R}{\hbar^2} (\vec{\nabla}(S))^2 \right) + V(x)R. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Comme les fonctions R et S sont réelles, les parties imaginaire et réelle de l'équation précédente doivent se séparer:

$$m \frac{\partial R}{\partial t} = -\vec{\nabla} R \cdot \vec{\nabla}(S) - \frac{1}{2} R \nabla^2 S, \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\nabla^2 R}{R} \right) - \frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} - V(x). \quad (2.5)$$

Il sera commode d'écrire:

$$Q = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R}, \quad (2.6)$$

où Q est appelé le potentiel quantique. Il nous faut aussi étudier un peu plus l'équation (2.4). Écrivons $P = R^2$. Nous obtenons donc:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(P \frac{\vec{\nabla} S}{m} \right) = 0. \quad (2.7)$$

Le développement que nous venons de faire était pour une particule, mais il se généralise de façon directe pour plusieurs particules dans un même système. Les équations suivantes sont aisément trouvées pour un cas de n particules:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = - \sum_{i=1}^n \frac{(\vec{\nabla}_i S)^2}{2m_i} - Q - V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n), \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \vec{\nabla}_i \cdot \frac{P \vec{\nabla}_i S}{m_i} = 0, \quad (2.9)$$

où, dans le cas présent,

$$Q = - \sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\vec{\nabla}_i^2 R}{R}. \quad (2.10)$$

Notons que dans l'interprétation de Bohm, la norme au carré de la fonction d'onde, qui est ici donnée par la fonction P , conserve la même nature que dans l'interprétation standard: elle représente toujours la distribution de probabilités. Nous sommes maintenant prêts à faire une des hypothèses de base de l'interprétation de Bohm. Nous pouvons remarquer que l'équation (2.8) est de la forme d'une équation de mouvement de Hamilton-Jacobi si (2.10) est un potentiel, et que l'équation (2.9) représente une équation de continuité pour la distribution de probabilité P si l'on pose que:

$$\vec{\nabla}_i(S) = \vec{p}_i \quad (2.11)$$

où \vec{p}_i est la quantité de mouvement de la particule i . Ceci peut aussi être écrit sous la forme

$$\vec{v}_i = \frac{\hbar}{m_i} \text{Im} \left[\frac{\vec{\nabla}_i \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n; t)}{\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n; t)} \right]. \quad (2.12)$$

L'équation (2.9) nous assure que si nous avons la bonne distribution de probabilité initiale, alors la distribution de probabilité finale sera nécessairement la bonne.

Lorsque nous prenons la limite vers le classique, i.e. $\hbar \rightarrow 0$, le potentiel quantique devient nul. L'équation (2.8) devient donc l'équation du mouvement de Hamilton-Jacobi sous sa forme habituelle en mécanique classique. Le passage du niveau quantique au niveau macroscopique s'effectue donc aisément.

À partir du moment où nous posons que la quantité de mouvement d'un système quantique est donnée par l'équation (2.11) et que Q représente un potentiel, il ne reste qu'une étape pour obtenir les bases de l'interprétation de Bohm. Il ne reste maintenant plus qu'à poser que les objets quantiques sont des particules dans le sens où on l'entend généralement. Celles-ci doivent donc avoir une position bien définie en tout temps. Comme les particules possèdent à la fois une position et une quantité de mouvement bien définies en tout temps, elles suivent nécessairement des trajectoires elles aussi bien définies.

Les probabilités ont une nature différente dans les interprétations standard et bohmiennes de la mécanique quantique. Dans la première, elles sont une caractéristique de la matière: elles sont donc objectives. Elles sont plutôt subjectives dans l'interprétation de Bohm, car elles ne représentent que l'effet de l'ignorance des propriétés initiales des particules.

Puisque dans l'interprétation de Bohm la distribution de probabilité est donnée par la même expression mathématique que dans l'interprétation standard, alors les prédictions des deux interprétations devraient être les mêmes. Les trajectoires des particules obligent donc celles-ci à suivre le comportement dicté par les probabilités. Malgré cette concordance entre les deux interprétations, certains proposent qu'il pourrait exister des situations où les trajectoires bohmiennes interdiraient certains comportements permis par l'interprétation standard. Le calcul des trajectoires bohmiennes tient donc de là une

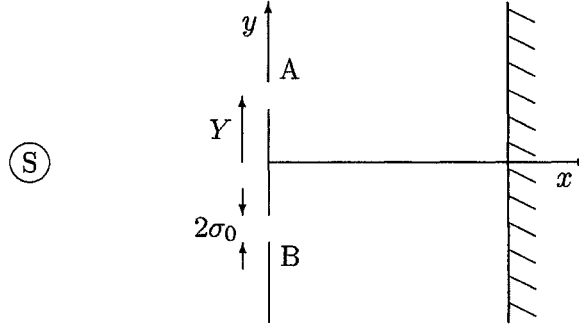
bonne partie de son importance.

2.2 Interférence d'une seule particule

L'interférence d'une particule est un phénomène connu depuis longtemps. L'apparition des franges lumineuses et sombres sur l'écran d'un dispositif semblable à celui montré à la figure 2.1 se produisit pour la première fois dans le laboratoire de Thomas Young autour de 1800. Considérée initialement comme étant due à la rencontre de deux ondes lumineuses en phase ou hors de phase, l'interférence était alors vue comme un phénomène purement ondulatoire. Toutefois, la mécanique quantique et l'avancement de la technologie ont changé radicalement l'interprétation que l'on en faisait. De nouvelles expériences montrèrent que l'interférence existe aussi pour des faisceaux de particules telles que les neutrons et les électrons. Ces derniers étant considérés comme des corpuscules, un tel résultat posait un problème d'ordre fondamental. Comment était-il possible que des corpuscules puissent produire un phénomène ondulatoire?

Un corpuscule étant localisé, il ne peut passer que par une seule fente. Cependant, lorsque l'on bouche l'une des fentes du dispositif, on n'aperçoit plus les franges à l'écran. Comment un corpuscule fait-il pour savoir si les deux fentes sont ouvertes ou non? D'autant plus que si l'on compare la distribution des positions finales dans les cas avec une seule et avec les deux fentes ouvertes, on voit que certains endroits sont accessibles aux corpuscules lorsqu'une fente est ouverte, mais ne le sont plus lorsque les deux fentes le sont. Pourquoi le fait d'ouvrir une deuxième fente empêcherait-il les corpuscules de se rendre à certains endroits sur l'écran? Manifestement, le concept de corpuscule ne semble pas s'accorder avec l'interférence.

De plus, des expériences permettant d'envoyer une seule particule à la fois dans un interféromètre montrèrent que le patron de franges se forme aussi dans ces conditions. L'explication initiale de la superposition de deux ondes venait de tomber. Qu'était donc l'interférence? Ce fut la mécanique quantique standard qui expliqua, d'une certaine façon, le phénomène. Regardons tout d'abord de quelle façon l'interférence est décrite

FIG. 2.1 – *Dispositif à deux fentes*

par la mécanique quantique standard. À la figure 2.1, la source S émet un seul type de particules avec les mêmes propriétés initiales. À la sortie des fentes, la fonction d'onde globale est composée de deux contributions, soit ψ_A et ψ_B , qui sont non nulles autour des fentes A et B respectivement. La fonction d'onde globale à droite des fentes sera donc donnée par:

$$\Psi = N [\psi_A + \psi_B], \quad (2.13)$$

où N est un facteur de normalisation. La distribution de probabilités de détection des particules sur l'écran sera donnée par le carré de la norme de Ψ :

$$|\Psi|^2 = N^2 [\psi_A^2 + \psi_B^2 + \psi_A^* \psi_B + \psi_A \psi_B^*]. \quad (2.14)$$

Les minimums d'interférence seront situés aux endroits où $|\Psi|^2 = 0$ ou presque. Notons qu'il est possible que cette expression soit nulle ou même très petite, sans que ψ_A ou ψ_B ne soit près de zéro. C'est donc, d'après l'interprétation standard de la mécanique quantique, l'incertitude sur la fente empruntée par la particule qui cause l'interférence. Les objets quantiques, qu'ils soient photons, électrons, neutrons ou autres, se retrouvent dans un état superposé où ils passent à la fois dans la fente A et la fente B . Il n'est donc pas difficile de voir pourquoi l'interférence d'une particule semble complètement incompatible avec le concept de particule.

Malgré cette explication qui porte beaucoup plus sur le comment du phénomène que son mécanisme interne, l'interférence d'une particule est relativement difficile à

comprendre. Probablement parce qu'il n'existe aucun équivalent classique de ce phénomène sur lequel il serait possible de se baser. Cette citation de Feynman [20] résume assez bien cette situation: "Nous choisissons d'examiner un phénomène (l'interférence) qu'il est impossible, *absolument* impossible, d'expliquer de n'importe quelle manière classique (...)".

Maintenant, comme dans l'interprétation de Bohm les objets quantiques sont des corpuscules, l'interférence semble causer un problème majeur. De quelle façon des particules pourraient-elles réussir à produire de l'interférence? Pour mieux le comprendre, il est nécessaire de procéder au calcul des trajectoires bohmiennes et du potentiel quantique.

Les premiers calculs de trajectoires bohmiennes pour l'interférence d'une particule ont été réalisés par Philippidis, Dewdney et Hiley [21]. La fonction d'onde globale qu'ils ont utilisée était très similaire à celle que nous avons sélectionnée. Le comportement général des trajectoires que nous avons calculées est très similaire à celui présenté dans [21].

Afin de pouvoir calculer les trajectoires bohmiennes pour ce type d'interférence, nous avons besoin de la fonction d'onde. Pour des fins d'illustration, les fonctions d'onde partielles ψ_A et ψ_B utilisées sont constituées à $t = 0$ de paquets d'onde plans selon x et gaussiens selon y . Le choix de ces fonctions d'onde est basé tout simplement sur le fait que la propagation dans le temps de tels paquets d'onde est connue exactement. L'équation (2.15) constitue donc la solution de l'équation de Schrödinger pour ces conditions initiales. Nous avons donc que:

$$\begin{aligned} \psi_A(x_i, y_i, t) = & (2\pi\sigma_t^2)^{-1/4} \exp \left\{ -(y_i - Y - \hbar k_y t/m)^2 / (4\sigma_0\sigma_t) \right\} \\ & \times \exp \left\{ i \left[k_x x_i + k_y (y_i - Y - \hbar k_y t/(2m)) - \hbar k_x^2 t/(2m) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

pour la particule i passant par la fente A et où

$$\sigma_t = \sigma_0 \left(1 + \frac{i\hbar t}{2m\sigma_0^2} \right). \quad (2.16)$$

Par symétrie du dispositif, il est aisé de voir que:

$$\psi_B(x_i, y_i, t) = \psi_A(x_i, -y_i, t). \quad (2.17)$$

Rappelons-nous que pour des raisons d'unicité de la solution, les trajectoires bohmiennes ne doivent pas se rencontrer. De plus, comme la fonction d'onde est symétrique par rapport à l'axe des x , on peut logiquement s'attendre à ce que les trajectoires le soient aussi. Pour le cas étudié ici, les particules seront donc contraintes à demeurer du côté de l'axe des x où elles étaient au temps $t = 0$.

Avec ces fonctions d'onde partielles, ainsi que l'équation (2.13), il ne reste que quelques simplifications à faire pour obtenir la fonction S définie en (2.1) et donc pour trouver les expressions donnant les différentes vitesses. Ainsi, en supprimant l'indice i ,

$$\Psi = \frac{N}{(2\pi\sigma_t^2)^{1/4}} \exp\{ig(x,t)\} \exp\left\{\frac{-y^2}{4\sigma_0\sigma_t}\right\} \times [\exp\{f(y,t)\} + \exp\{-f(y,t)\}], \quad (2.18)$$

où

$$f(y,t) = \frac{y(Y + \hbar k_y t/m)}{2\sigma_0\sigma_t} + ik_y y, \quad (2.19)$$

$$g(x,t) = k_x x - k_y(Y + \hbar k_y t/(2m)) - \hbar k_x^2 t/(2m) + \frac{i(Y + \hbar k_y t/m)^2}{4\sigma_0\sigma_t}. \quad (2.20)$$

En utilisant le fait que $2 \cosh(x) = \exp(x) + \exp(-x)$,

$$\Psi = \frac{2N}{(2\pi\sigma_t^2)^{1/4}} \exp\{ig(x,t)\} \times \exp\left\{\frac{-y^2}{4\sigma_0\sigma_t}\right\} \times \cosh\{f(y,t)\}. \quad (2.21)$$

Maintenant, à l'aide de (2.16), il est possible d'écrire

$$\frac{1}{2\sigma_0\sigma_t} = \frac{1}{2\sigma_0^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{2m\sigma_0^2}\right)} = \frac{m(2m\sigma_0^2 - i\hbar t)}{4m^2\sigma_0^4 + \hbar^2 t^2} = p(t)(2m\sigma_0^2 - i\hbar t), \quad (2.22)$$

où

$$p(t) = \frac{m}{4m^2\sigma_0^4 + \hbar^2 t^2}. \quad (2.23)$$

Cela nous permet d'écrire que

$$f(y,t) = y(Y + \hbar k_y t/m)p(t)(2m\sigma_0^2 - i\hbar t) + ik_y y, \quad (2.24)$$

et que

$$\begin{aligned} \Psi &= \frac{2N}{(2\pi\sigma_t^2)^{1/4}} \exp\{ig(x,t)\} \exp\left\{-(1/2)y^2 p(t)(2m\sigma_0^2 - i\hbar t)\right\} \\ &\times \cosh\left\{y(Y + \hbar k_y t/m)p(t)(2m\sigma_0^2 - i\hbar t) + ik_y y\right\}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

En utilisant le fait que, pour un w et un z réels,

$$|\cosh(w + iz)|^2 = (\cosh(2w) + \cos(2z))/2, \quad (2.26)$$

et que l'argument de $\cosh(w + iz)$ est donné par:

$$\arg(\cosh(w + iz)) = \arctan(\tan(z) \tanh(w)), \quad (2.27)$$

la fonction d'onde globale est donnée par

$$\begin{aligned} \Psi = & \frac{2N}{(8\pi\sigma_t^2)^{1/4}} \exp\{ig(x,t)\} \exp\{-(1/2)y^2 p(t)(2m\sigma_0^2 - i\hbar t)\} \\ & \times \sqrt{\cosh[4m\sigma_0^2\xi] + \cos[-2\hbar t\xi + 2k_y y]} \\ & \times \exp[i \arctan(\tan(k_y y - \hbar t\xi) \tanh(2m\sigma_0^2\xi))], \end{aligned} \quad (2.28)$$

où

$$\xi(y,t) \equiv \frac{my(Y + \hbar t k_y/m)}{(\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4)}. \quad (2.29)$$

Ceci donne finalement la distribution de probabilité P et la fonction S suivantes:

$$\begin{aligned} P(x,y,t) = & \frac{4N^2}{|(8\pi\sigma_t^2)^{1/4}|^2} \exp\{-2m\sigma_0^2 p(t)(y^2 + (Y + \hbar k_y t/m)^2)\} \\ & \times (\cosh[4m\sigma_0^2\xi] + \cos[-2\hbar t\xi + 2k_y y]) \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{S}{\hbar} = & k_x x - k_y(Y + \hbar k_y t/(2m)) - \hbar k_x^2 t/(2m) + (1/2)\hbar t(y^2 + (Y + \hbar k_y t/m)^2)p(t) \\ & + \arg[\sigma_t^{-1/2}] + \arctan(\tan(k_y y - \hbar t\xi) \tanh(2m\sigma_0^2\xi)). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Les expressions donnant les vitesses sont aisées à obtenir à l'aide de la dernière équation. Cependant, avant de le faire, il est intéressant de jeter un coup d'oeil plus approfondi à la distribution de probabilités donnée en (2.30). On s'aperçoit rapidement que les premiers facteurs ne font que donner une forme de base à P et ne peuvent jamais être nuls. La position des minimums d'interférence¹, se situant aux endroits où la fonction P est nulle ou très petite, sera déterminée par le facteur de la somme du cosinus hyperbolique et du cosinus. La fonction cosinus hyperbolique ne permettant pas

1. Les minimums d'interférence sont parfois appelés noeuds.

de valeurs inférieures à 1, c'est la présence du cosinus qui causera les minimums. En effet, le cosinus est le seul terme dans toute la fonction P qui puisse être négatif.

Retournons à présent au calcul de la vitesse des particules. La composante selon x est très simple à obtenir:

$$v_x(x,y,t) = \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial x} = \frac{\hbar}{m} \frac{\partial g(x,t)}{\partial x} = \frac{\hbar k_x}{m}. \quad (2.32)$$

Pour ce qui est de la composante selon y , une fois que nous avons posé que $k_y = 0$, un peu de calcul et l'utilisation de certaines identités trigonométriques ainsi que de l'équation (2.19) permettent de trouver:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} \arctan(\tan(\hbar t \xi) \tanh(2m\sigma_0^2 \xi)) \\ = \frac{mY}{\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4} \times \frac{\hbar t \sinh(4m\sigma_0^2 \xi) + 2m\sigma_0^2 \sin(2\hbar t \xi)}{\cosh(4m\sigma_0^2 \xi) + \cos(2\hbar t \xi)}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Cela donne finalement que:

$$\begin{aligned} v_y(x,y,t) &= \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial y} \\ &= \frac{\hbar^2 t y}{\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4} - \frac{\hbar^2 Y t \sinh(4m\sigma_0^2 \xi) + 2mY \hbar \sigma_0^2 \sin(2\hbar t \xi)}{(\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4) [\cosh(4m\sigma_0^2 \xi) + \cos(2\hbar t \xi)]}. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Comme la composante de la vitesse selon x est constante et que $x(0) = 0$, il n'est pas difficile de montrer que les trajectoires selon x sont données par $x(t) = v_x t$. Comme pour une onde plane la vitesse des particules est toujours constante dans l'interprétation de Bohm, les trajectoires selon les dimensions où la fonction d'onde est plane ne seront pas calculées. Comme il n'y a qu'un facteur de proportionnalité entre le temps t et x (ou toute autre dimension de ce type), il n'est pas difficile de faire le lien entre les deux.

Les figures 2.2, 2.3 et 2.4 montrent certains des résultats les plus intéressants. Les valeurs numériques utilisées sont en unités atomiques (a.u.), qui se retrouvent à la table 2.1. Elles sont telles que $\hbar = 1$ a.u. et que la vitesse de la lumière, c , vaut 1 elle aussi. Nous avons pris $m = 1$ a.u., soit la masse de l'électron, $k_y = 0$ Bohr⁻¹, $k_x = 0.01$ Bohr⁻¹, $Y = 1$ a.u. et $\sigma_0 = 0.2$ a.u. Le temps écoulé va de $t = 0$ a.u. à $t = 1$ a.u..² Bien que les

2. Les valeurs numériques utilisées ne sont pas celles de Philippidis, Dewdney et Hiley [21].

	Unités atomiques	Unités MKS
Masse	1 a.u. = 1 masse de l'électron	9.10939×10^{31} kg
Énergie	1 a.u. = 1 Hartree (E_h)	$4.3597482 \times 10^{-18}$ J
Temps	1 a.u. = $1 \hbar/E_h$	$2.418884326555 \times 10^{-17}$ s
Distance	1 a.u. = 1 Bohr	5.2917725×10^{-9} m

Tab. 2.1 – *Tableau de conversion des unités atomiques en unités MKS.*

valeurs choisies ne représentent pas celles d'une expérience réaliste, il est possible, une fois les résultats obtenus, de modifier le système d'unités sans pour autant modifier les résultats. Le plus important est que l'équation de Schrödinger puisse toujours s'écrire sous la forme:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \psi. \quad (2.35)$$

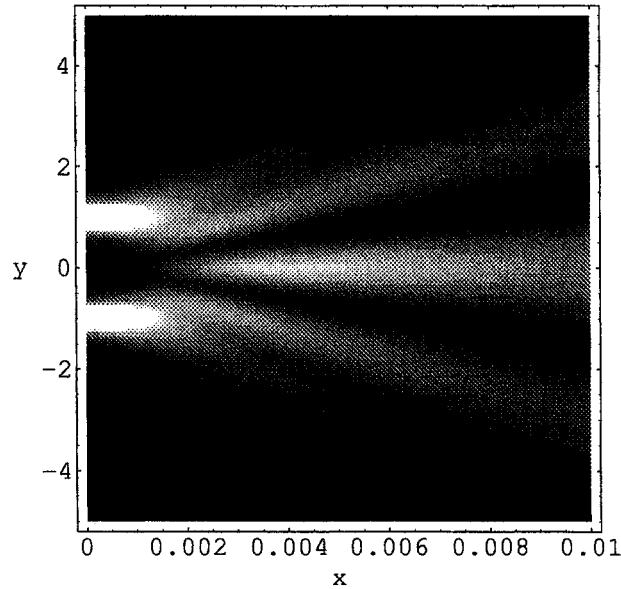
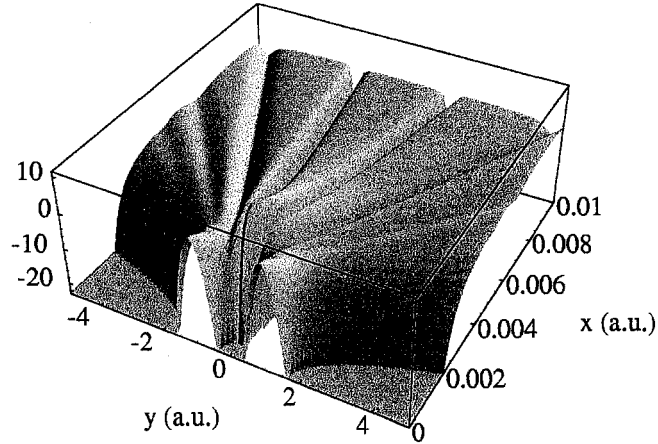


FIG. 2.2 – *Distribution de probabilités, P , exacte pour l'interférence d'une particule obtenue à partir de la fonction d'onde. Une couleur plus claire signifie une probabilité plus élevée. Les échelles sont en unités atomiques.*

FIG. 2.3 – *Potentiel quantique pour l'interférence d'une particule.*

La figure 2.2 montre la distribution de probabilité pour le cas que nous étudions. Les zones plus claires représentent les endroits où la probabilité est plus forte de retrouver une particule. Il est aisé de voir que les franges du patron d'interférence sont bel et bien présentes à l'écran, situé à $x = 0.01$ a.u..

Pour ce qui est du potentiel quantique, qui est représenté à la figure 2.3, on remarque des régions de plateaux entre lesquelles se retrouvent des vallées. Les plateaux sont situés au même endroit que les maximums d'interférence et les vallées dans les minimums. L'interprétation de ce résultat est assez simple. Lorsque le potentiel quantique varie rapidement, la force exercée sur les particules est grande, ce qui oblige la particule à quitter cette région. Les particules tendront donc à rester dans les régions des plateaux. Si l'une d'entre elles s'aventure hors des plateaux, elle ne passera qu'un court moment dans une vallée avant de rejoindre un autre plateau. Cette interprétation est corroborée par les trajectoires bohmiennes montrées à la figure 2.4. Les positions initiales utilisées pour calculer ces trajectoires se situent entre $\pm(Y + 2.5\sigma_0)$ et $\pm(Y - 2.5\sigma_0)$ et leur distribution est gaussienne. La distribution finale des trajectoires de la figure 2.4 représente la vraie distribution. On remarque assez rapidement qu'à la figure 2.2, plus le maximum est situé près de $y = 0$, plus il devrait être densément peuplé. Cette particularité est présente dans les trajectoires montrées ici.

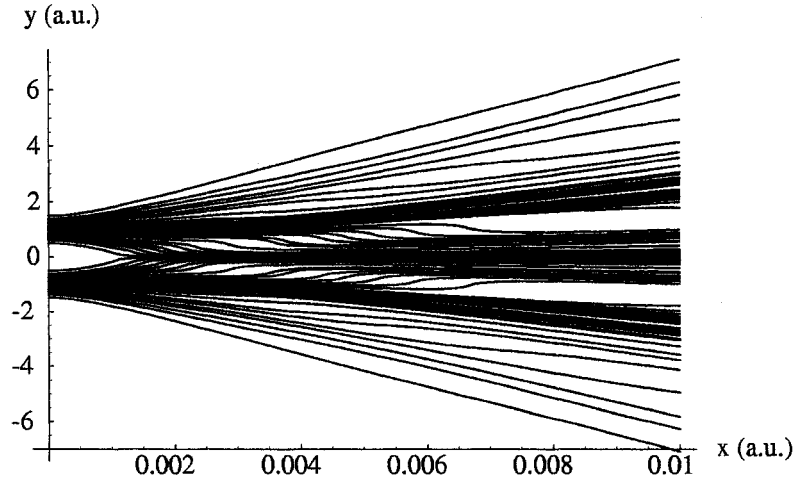


FIG. 2.4 – 82 trajectoires pour l'interférence d'une particule.

On remarque aussi que lorsqu'une trajectoire passe d'un maximum à l'autre, elle subit une courbure qui reflète l'accélération selon y de la particule due au passage dans une vallée du potentiel quantique. Un autre fait intéressant: les trajectoires se regroupent près des maximums, ce qui explique que ceux-ci ont une certaine étendue. De plus, si l'on effectue les calculs pour un temps beaucoup plus élevé, on remarque que les trajectoires restent groupées, mais que les groupes s'élargissent sans toutefois se toucher. Le patron d'interférence est alors très clairement défini.

C'est donc le potentiel quantique qui cause la présence des franges d'interférence. C'est aussi lui qui "avertit" les particules du fait qu'une seule fente ou que les deux fentes sont ouvertes sur l'interféromètre. En effet, si une fente est fermée, par exemple la fente B , la fonction d'onde globale est alors donnée par ψ_A . Le potentiel quantique pour une telle fonction d'onde est donné par:

$$Q = \hbar^2 \sigma_0^2 m \left[\frac{\hbar^2 t^2 - 2m^2 \sigma_0^2 ((Y - y)^2 - 2\sigma_0^2)}{(\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4)^2} \right]. \quad (2.36)$$

Comme ce potentiel quantique est donné par une fonction quadratique en y , il n'est pas difficile de voir qu'il ne présente pas les caractéristiques nécessaires à la formation du patron d'interférence.

L'explication du phénomène de l'interférence d'une seule particule, en terme de

concepts classiques tels que corpuscules et potentiel, vient donc d'être donnée par la mécanique quantique bohmienne. Non seulement les mécanismes internes du phénomène ont été donnés et sont cohérents, mais, en plus, le potentiel quantique, déduit uniquement à partir de la fonction d'onde utilisée, permet de réconcilier le concept de corpuscule avec l'interférence d'une particule.

Chapitre 3

Interférence de deux particules avec fonctions d'onde gaussiennes

Les résultats présentés dans ce chapitre ont été publiés dans [18]. Pour obtenir de l'interférence de deux particules, on peut utiliser le dispositif montré à la figure 2.1, page 13, ou encore celui de la figure 3.1 (ces dispositifs sont ceux proposés dans [11, 12, 13, 14]). La différence majeure entre ce type d'interférence et celui que nous venons tout juste de voir est essentiellement la source de particules utilisée. Alors que la source émettait des particules indépendantes dans le cas précédent, ici, elle émet des paires de particules corrélées. C'est pourquoi ce type d'interférence est considéré comme étant un phénomène de deux particules. Ce type d'interférence n'est donc pas connu depuis très longtemps, étant donné qu'il faut produire des paires de particules corrélées pour l'obtenir¹. Contrairement à l'interférence d'une particule, il n'y aura pas de franges sur l'écran ou le détecteur. En fait, il existe un patron d'interférence, mais il appartient à l'espace de configuration. Dans le cas du premier dispositif, la corrélation entre les particules d'une paire, déterminée par la source S , oblige l'une des particules à emprunter la fente A et l'autre la fente B . Ici, ce sera l'incertitude sur la particule qui emprunte chaque fente qui produira l'interférence. On peut obtenir un tel

1. On peut obtenir de telles paires avec la production de photons en cascade ou par conversion paramétrique.

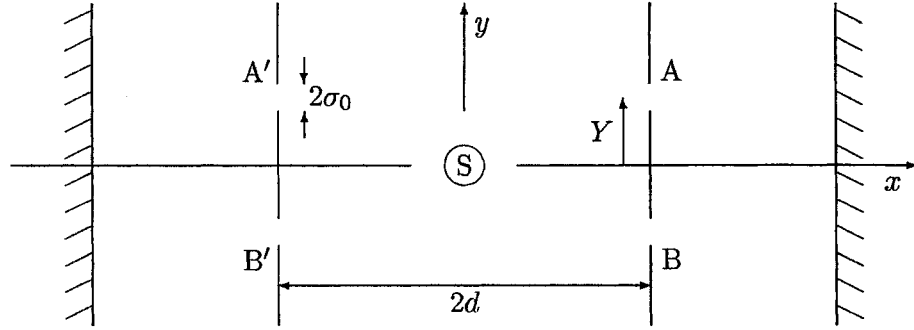


FIG. 3.1 – Dispositif à quatre fentes

comportement si l'impulsion totale en y d'une paire est nulle, alors que celle en x est constante et égale pour chacune des particules. En définissant comme auparavant les fonctions d'onde partielles ψ_A et ψ_B , de même qu'en notant les coordonnées de l'une des particules d'une paire par l'indice 1 et celles de l'autre par 2, nous obtenons que la fonction d'onde globale est:

$$\Psi_{2\text{fentes}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = N [\psi_A(\vec{r}_1, t) \psi_B(\vec{r}_2, t) \pm \psi_B(\vec{r}_1, t) \psi_A(\vec{r}_2, t)], \quad (3.1)$$

où le signe supérieur doit être utilisé si les particules sont des bosons et le signe inférieur dans le cas des fermions. Ceci est dû au fait que comme les particules d'une même paire sont identiques, alors la fonction d'onde globale doit être soit symétrique ou antisymétrique par rapport à la permutation des particules. Notons que N sera utilisé comme un symbole réservé au facteur de normalisation et qu'il s'adaptera au besoin.

La fonction d'onde globale pour le dispositif à quatre fentes est:

$$\begin{aligned} \Psi_{4\text{fentes}} = N [\psi_A(x_1, y_1, t) \psi_{B'}(x_2, y_2, t) \pm \psi_A(x_2, y_2, t) \psi_{B'}(x_1, y_1, t) \\ + \psi_{A'}(x_2, y_2, t) \psi_B(x_1, y_1, t) \pm \psi_{A'}(x_1, y_1, t) \psi_B(x_2, y_2, t)], \end{aligned} \quad (3.2)$$

où

$$\psi_{A'}(x, y, t) = \psi_A(-x, y, t), \quad (3.3)$$

$$\psi_{B'}(x, y, t) = \psi_B(-x, y, t) = \psi_A(-x, -y, t). \quad (3.4)$$

Ici, la quantité de mouvement totale d'une paire est nulle. Cela implique que si l'une des deux particules d'une paire s'engage dans la fente A , alors l'autre particule

empruntera la fente B' et vice-versa. La même situation prévaut pour les fentes B et A' . Notons que le signe du haut doit être choisi pour les bosons et celui du bas pour les fermions. La fonction d'onde est donc symétrique ou anti-symétrique sous la permutation des particules, tel que nécessaire. La fonction (3.2) est symétrique vis-à-vis une réflexion par rapport à l'axe des x , alors qu'elle est symétrique pour les bosons et anti-symétrique pour les fermions sous une réflexion par rapport à l'axe des y .

L'équation (3.2) mérite qu'on s'y attarde quelque peu. Tout d'abord, il est bien de noter que l'on peut écrire la fonction d'onde partielle $\psi_A(x_i, y_i, t)$ donnée à l'équation (2.15) sous la forme suivante:

$$\psi_A(x_i, y_i, t) = \exp \{ik_x x_i\} F(y_i, t). \quad (3.5)$$

Avec les diverses équations donnant les fonctions ψ_B , $\psi_{A'}$ et $\psi_{B'}$ en fonction de ψ_A , la fonction d'onde globale (3.2) peut donc s'écrire comme

$$\begin{aligned} \Psi_{4\text{fentes}} &= N [\exp \{ik_x(x_1 - x_2)\} F(y_1, t)F(-y_2, t) \pm \exp \{ik_x(x_2 - x_1)\} F(y_2, t)F(-y_1, t) \\ &\quad + \exp \{ik_x(x_1 - x_2)\} F(y_2, t)F(-y_1, t) \pm \exp \{ik_x(x_2 - x_1)\} F(y_1, t)F(-y_2, t)] \\ &= N [F(y_1, t)F(-y_2, t) + F(y_2, t)F(-y_1, t)] \\ &\quad \times (\exp \{ik_x(x_1 - x_2)\} \pm \exp \{ik_x(x_2 - x_1)\}) \\ &= NG(y_1, y_2, t) \times \begin{cases} 2 \sin(k_x(x_1 - x_2)) & \text{pour les fermions (signe négatif),} \\ 2 \cos(k_x(x_1 - x_2)) & \text{pour les bosons (signe positif).} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Nous pouvons aisément voir que la dépendance en x_1 et x_2 de la fonction d'onde est uniquement réelle. Cela aura pour conséquence que la fonction S de l'équation (2.1) ne dépendra pas de x_1 et x_2 . Ainsi, la vitesse selon x des deux particules d'une paire est nulle. Donc, les particules ne se déplacent pas selon x ...

Ce résultat est dû au fait qu'avec les fonctions d'onde d'une particule écrites comme en (2.15), (2.17), (3.3) et (3.4), l'équation (3.2) ne représente pas bien la situation illustrée à la figure 3.1. En effet, toutes ces fonctions d'onde partielles sont étendues infiniment dans les directions positives et négatives de l'axe des x . Cependant, les équations

tions (2.15) et (2.17) pour ψ_A et ψ_B ne devraient clairement être valides que dans les régions où $x > d$, alors que (3.3) et (3.4) pour $\psi_{A'}$ et $\psi_{B'}$ ne le sont que pour $x < -d$. La fonction d'onde globale doit donc être réécrite comme:

$$\Psi = N'[\psi_A(x_1, y_1, t) \psi_{B'}(x_2, y_2, t) + \psi_{A'}(x_2, y_2, t) \psi_B(x_1, y_1, t)] \quad (3.7)$$

si $x_1 > d$ et $x_2 < -d$, et comme

$$\Psi = \pm N'[\psi_A(x_2, y_2, t) \psi_{B'}(x_1, y_1, t) + \psi_{A'}(x_1, y_1, t) \psi_B(x_2, y_2, t)] \quad (3.8)$$

si $x_1 < -d$ et $x_2 > d$.

Les deux expressions que nous venons de voir pour la fonction d'onde globale ne se superposent pas dans l'espace de configuration. Alors [22], les trajectoires bohmiennes associées à une de ces fonctions globales sont complètement indépendantes de l'autre forme de la fonction d'onde globale. Comme il est nécessaire, les équations (3.7) et (3.8) se transforment l'une dans l'autre, avec les bons signes, sous la permutation des particules.

Il est aisé de vérifier qu'à un facteur multiplicatif près, l'équation (3.7) peut être obtenue à partir de l'équation (3.1) (avec un signe positif) en effectuant la substitution $x_2 \rightarrow -x_2$. De (2.11), nous pouvons voir que toutes les composantes de la vitesse sont les mêmes avec les deux fonctions d'onde, à l'exception près que v_{2x} devient $-v_{2x}$. Nous pouvons conclure que les trajectoires bohmiennes dans les deux situations correspondent une à une avec x_2 étant réfléchi dans le plan- yz .

En appliquant le même argument, on montre que les trajectoires bohmiennes calculées avec (3.8) et (3.1) possèdent aussi le même type de correspondance, avec x_1 étant réfléchi dans le plan- yz .

À cause de cela, nous ne discuterons plus que du dispositif à deux fentes, en nous rappelant que les résultats obtenus pour ce dispositif sont aussi valides pour celui à quatre fentes.

3.1 Prédiction des deux interprétations

Voyons maintenant quelles sont les prédictions des deux interprétations de la mécanique quantique pour l'interférence de deux particules. Cela nous permettra de voir ce que Ghose [11] ainsi que Golshani et Akhavan [12, 13, 14] ont proposé comme différence entre les prédictions des deux interprétations.

Prenons tout d'abord une paire de particules partant des fentes au temps $t = 0$ avec une quantité de mouvement selon x valant $\hbar k_x$. Dans l'interprétation standard, la probabilité de trouver les particules en y_1 et y_2 lorsqu'elles arrivent à l'écran au temps t est donné par:

$$P(y_1, y_2, t) = |\Psi(y_1, y_2, t)|^2. \quad (3.9)$$

Supposons maintenant que t soit tel que $|\sigma_t| \approx \sigma_0$. Alors, les paquets d'onde n'ont pas le temps de prendre beaucoup d'expansion. Leur superposition ne sera pas importante, ce qui aura comme conséquence que la probabilité de trouver les deux particules d'une même paire d'un seul côté de l'axe des x sera très faible. De plus, les effets d'interférence seront peu apparents. La détection des deux particules sera donc assez symétrique par rapport à l'axe des x .

Cependant, si t est tel que $|\sigma_t| \gg \sigma_0$, alors nous aurons la situation inverse. Comme la superposition des paquets d'onde sera plus importante, les effets d'interférence le seront beaucoup plus et la probabilité de trouver les deux particules du même côté de l'axe des x augmentera. De plus, la probabilité d'une détection asymétrique des particules sera elle aussi plus élevée.

Pour mieux comprendre les prédictions de l'interprétation de Bohm, nous avons besoin de connaître la vitesse des deux particules d'une paire. La vitesse peut être calculée à partir de (2.1) et de (3.1). Les dérivations se simplifient considérablement si l'on prend $k_y = 0$, un choix que nous faisons. En substituant les fonctions d'onde ψ_A et ψ_B dans (3.1) et en négligeant les facteurs qui ne dépendent pas des coordonnées des

particules, nous avons:

$$\begin{aligned} \Psi \sim & \exp \{i [k_x(x_1 + x_2)]\} \left\{ \exp \left[-\frac{y_1^2 + y_2^2 + 2Y(y_2 - y_1)}{4\sigma_0\sigma_t} \right] \right. \\ & \left. \pm \exp \left[-\frac{y_1^2 + y_2^2 - 2Y(y_2 - y_1)}{4\sigma_0\sigma_t} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Avec la dernière équation, nous voyons immédiatement que:

$$v_{1x} = \frac{\hbar k_x}{m} = v_{2x}. \quad (3.11)$$

Les composantes en y de la vitesse sont plus difficiles à obtenir. En ne conservant cette fois-ci que les facteurs en y_1 et y_2 , et en utilisant (2.16), nous avons:

$$\Psi \sim \exp(-f) \{ \exp(-g) \pm \exp(g) \}, \quad (3.12)$$

où

$$f = \left\{ 4\sigma_0^2 \left[1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_0^2} \right)^2 \right] \right\}^{-1} \left[1 - \frac{i\hbar t}{2m\sigma_0^2} \right] (y_1^2 + y_2^2), \quad (3.13)$$

$$g = \left\{ 4\sigma_0^2 \left[1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_0^2} \right)^2 \right] \right\}^{-1} \left[1 - \frac{i\hbar t}{2m\sigma_0^2} \right] 2Y(y_2 - y_1). \quad (3.14)$$

Avec (2.1), nous trouvons que:

$$v_{1y} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ -\frac{\partial f}{\partial y_1} + \left(\frac{\partial g}{\partial y_1} \right) \frac{-\exp(-g) \pm \exp(g)}{\exp(-g) \pm \exp(g)} \right\}. \quad (3.15)$$

Notons que:

$$\frac{-\exp(-g) \pm \exp(g)}{\exp(-g) \pm \exp(g)} = \tanh(g)^{\pm 1}, \quad (3.16)$$

et utilisons l'identité trigonométrique suivante, où w et z sont des fonctions ou des variables réelles:

$$\tanh(w + iz)^{\pm 1} = \frac{\sinh(2w) \pm i \sin(2z)}{\cosh(2w) \pm \cos(2z)}. \quad (3.17)$$

En réécrivant g sous la forme

$$2g = -2m\sigma_0^2\alpha + i\hbar t\alpha, \quad (3.18)$$

où

$$\alpha = \frac{2Ym(y_1 - y_2)}{\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4}. \quad (3.19)$$

et en calculant les dérivées dont nous avons besoin,

$$\frac{\partial f}{\partial y_i} = \frac{m(2m\sigma_0^2 - i\hbar t)y_i}{\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4}, \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial g}{\partial y_1} = -\frac{mY(2m\sigma_0^2 - i\hbar t)}{\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4}, \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial g}{\partial y_2} = \frac{mY(2m\sigma_0^2 - i\hbar t)}{\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4}, \quad (3.22)$$

l'équation suivante pour la vitesse est obtenue:

$$v_{1y} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[-\frac{m(2m\sigma_0^2 - i\hbar t)y_1}{\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4} - \frac{mY(2m\sigma_0^2 - i\hbar t)}{\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4} \times \left\{ \frac{-\sinh(2m\sigma_0^2 \alpha) \pm i \sin(\hbar t \alpha)}{\cosh(2m\sigma_0^2 \alpha) \pm \cos(\hbar t \alpha)} \right\} \right]. \quad (3.23)$$

Après quelques simplifications mineures, ceci donne finalement

$$v_{1y} = -\frac{2\hbar Y m \sigma_0^2 \sin(\hbar t \alpha) \pm Y \hbar^2 t \sinh(2m\sigma_0^2 \alpha)}{(\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4) [\cos(\hbar t \alpha) \pm \cosh(2m\sigma_0^2 \alpha)]} + \frac{\hbar^2 t y_1}{\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4}, \quad (3.24)$$

où nous avons conservé la même convention pour les signes. L'autre composante de la vitesse selon y peut être obtenue de la même façon. En notant que le terme en g ne fera que changer de signe, si l'on se réfère à (3.22),

$$v_{2y} = \frac{2\hbar Y m \sigma_0^2 \sin(\hbar t \alpha) \pm Y \hbar^2 t \sinh(2m\sigma_0^2 \alpha)}{(\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4) [\cos(\hbar t \alpha) \pm \cosh(2m\sigma_0^2 \alpha)]} + \frac{\hbar^2 t y_2}{\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4}. \quad (3.25)$$

Il est aisé de vérifier que les composantes de la vitesse satisfont aux égalités suivantes:

$$\begin{aligned} v_{iy}(x_1, y_1; x_2, y_2; t) &= -v_{iy}(x_1, -y_1; x_2, -y_2; t) \quad (i = 1, 2) \\ v_{1y}(x_1, y_1; x_2, y_2; t) &= -v_{2y}(x_1, -y_2; x_2, -y_1; t). \end{aligned} \quad (3.26)$$

De plus, la composante en y des coordonnées du centre de masse satisfait à:

$$\dot{y}(t) \equiv \frac{v_{1y} + v_{2y}}{2} = \frac{\hbar^2 t y}{\hbar^2 t^2 + 4m^2 \sigma_0^4}. \quad (3.27)$$

Cette expression s'intègre directement comme [13]

$$y(t) = y(0) \left\{ 1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_0^2} \right)^2 \right\}^{1/2} = y(0) \frac{|\sigma_t|}{\sigma_0}. \quad (3.28)$$

Une chose assez intéressante se produit si les deux particules d'une paire ont des positions initiales symétriques, i.e. si $y(0) = 0$. La dernière équation implique alors que $y(t) = 0$ pour tout t . Cela signifie donc que si les particules d'une paire sont initialement disposées symétriquement par rapport à l'axe des x , alors elles le resteront. De la même façon, si $y(0)$ est très petit, ou du moins beaucoup plus petit que σ_0 , alors $y(t)$ restera suffisamment petit pour que les deux particules soient détectées en des positions presque symétriques à l'écran.

C'est à partir de ces observations que Ghose [11] et Golshani et Akhavan [14] ont proposé que l'interprétation de Bohm pourrait faire des prédictions différentes de l'interprétation standard. Selon eux, ces différences seraient vérifiables expérimentalement. Pour ce faire, il suffirait de préparer un certain nombre de paires telles que $|y(0)| \ll \sigma_0$ et les détecter à un temps t . Nous avons vu que l'interprétation standard prédit une probabilité assez élevée d'obtenir des détections asymétriques d'une paire si $|\sigma_t| \gg \sigma_0$, alors qu'avec un $y(0)$ assez petit, l'interprétation de Bohm prédit des détections plutôt symétriques dans cette même condition. Bien entendu, la vérification expérimentale d'une telle différence est assez aisée à effectuer.

Malheureusement, l'argumentation qui vient d'être faite possède une faille importante, telle qu'indiquée dans [16, 17]. En effet, une sélection de valeurs de $y(0)$ telle que proposée par Ghose et Golshani et Akhavan est incompatible avec les hypothèses de base de l'interprétation de Bohm. En effet, dans cette interprétation, tout comme dans l'interprétation standard, la distribution de probabilités de la position des particules est donnée par la norme au carré de la fonction d'onde. En utilisant les expressions des fonctions d'onde que nous avons présentées plus haut, nous pouvons voir qu'à $t = 0$, la distribution des positions selon y est donnée par ($k_y = 0$):

$$P(y_1, y_2, 0) = |N|^2 (2\pi\sigma_0^2)^{-1} \{F + G \pm 2H\}, \quad (3.29)$$

où

$$F = \exp \left\{ -\frac{(y_1 - Y)^2 + (y_2 + Y)^2}{2\sigma_0^2} \right\}, \quad (3.30)$$

$$G = \exp \left\{ -\frac{(y_2 - Y)^2 + (y_1 + Y)^2}{2\sigma_0^2} \right\}, \quad (3.31)$$

$$H = \exp \left\{ -\frac{y_1^2 + y_2^2 + 2Y^2}{2\sigma_0^2} \right\}. \quad (3.32)$$

Pour obtenir la valeur de N , il faut calculer la norme de la fonction d'onde, soit effectuer les intégrales suivantes:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} P(y_1, y_2, 0) dy_1 dy_2 = \frac{|N|^2}{2\pi\sigma_0^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (F + G \pm 2H) dy_1 dy_2. \quad (3.33)$$

Une intégration élémentaire montre que:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F dy_1 dy_2 &= 2\pi\sigma_0^2 \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G dy_1 dy_2 &= 2\pi\sigma_0^2 \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} H dy_1 dy_2 &= 2\pi\sigma_0^2 \exp \left(-\frac{Y^2}{\sigma_0^2} \right). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Donc, pour que l'équation (3.33) soit respectée,

$$|N|^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \exp \left(-\frac{Y^2}{\sigma_0^2} \right) \right\}^{-1}. \quad (3.35)$$

La valeur moyenne $\langle y_1 + y_2 \rangle$ est calculée comme suit. Si nous utilisons la symétrie de la fonction P par rapport à y_1 et y_2 ,

$$\begin{aligned} \langle y_1 + y_2 \rangle &= \langle y_1 \rangle + \langle y_2 \rangle = 2\langle y_1 \rangle \\ &= 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y_1 P(y_1, y_2, 0) dy_1 dy_2 \\ &= 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y_1 (F + G \pm 2H) dy_1 dy_2 \end{aligned} \quad (3.36)$$

et, comme

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y_1 F dy_1 dy_2 &= 2\pi\sigma_0^2 Y, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y_1 G dy_1 dy_2 &= -2\pi\sigma_0^2 Y, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y_1 H dy_1 dy_2 &= 0, \end{aligned} \quad (3.37)$$

la valeur moyenne obtenue est

$$\langle y_1 + y_2 \rangle = 0. \quad (3.38)$$

L'écart-type $\Delta y(0)$ sera donc donné par:

$$\begin{aligned} \Delta y(0) &= \frac{1}{2} \sqrt{\langle (y_1 + y_2)^2 \rangle} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (y_1^2 + y_2^2 + 2y_1 y_2) P(y_1, y_2, 0) dy_1 dy_2 \right\}^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Les intégrales nécessaires pour ce calcul sont donc les suivantes:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y_1^2 F dy_1 dy_2 &= 2\pi\sigma_0^2(Y^2 + \sigma_0^2) \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y_1^2 G dy_1 dy_2 &= 2\pi\sigma_0^2(Y^2 + \sigma_0^2) \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y_1^2 H dy_1 dy_2 &= 2\pi\sigma_0^4 \exp\left(-\frac{Y^2}{\sigma_0^2}\right) \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y_1 y_2 F dy_1 dy_2 &= -2\pi\sigma_0^2 Y^2 \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y_1 y_2 G dy_1 dy_2 &= -2\pi\sigma_0^2 Y^2 \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y_1 y_2 H dy_1 dy_2 &= 0. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \langle y_1^2 + y_2^2 \rangle &= \frac{|N|^2}{2\pi\sigma_0^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y_1^2 (F + G \pm 2H) dy_1 dy_2 \\ &= \frac{Y^2 + \sigma_0^2 [1 \pm \exp\left(-\frac{Y^2}{\sigma_0^2}\right)]}{1 \pm \exp\left(-\frac{Y^2}{\sigma_0^2}\right)}, \end{aligned} \quad (3.41)$$

et

$$\begin{aligned} \langle y_1 y_2 \rangle &= \frac{|N|^2}{2\pi\sigma_0^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y_1 y_2 (F + G \pm 2H) dy_1 dy_2 \\ &= \frac{-Y^2}{1 \pm \exp\left(-\frac{Y^2}{\sigma_0^2}\right)}, \end{aligned} \quad (3.42)$$

ce qui donne finalement

$$\Delta y(0) = \frac{\sigma_0}{\sqrt{2}}. \quad (3.43)$$

Cela prouve qu'il n'est donc pas possible, dans l'interprétation de Bohm, de choisir un certain nombre de positions initiales telles que $|y(0)| \ll \sigma_0$. Une telle sélection

reviendrait soit à prendre une fonction d'onde différente ou encore à faire des hypothèses sur la distribution des vraies positions des particules qui seraient différentes de celles faites par Bohm à l'origine.

3.2 Trajectoires

Maintenant, bien qu'il puisse être prouvé analytiquement que les deux interprétations font les mêmes prédictions dans le cas qui nous intéresse, il est instructif de vérifier directement que les trajectoires bohmiennes vont effectivement se conformer au bon comportement. Afin de vérifier ce point, nous avons calculé certaines trajectoires à partir des expressions des composantes de la vitesse vues précédemment. Pour ce faire, un algorithme de Runge-Kutta d'ordre quatre et cinq a été utilisé à la fois dans Mathematica et dans un programme en C pour fin de vérification. Les résultats montrés ici correspondent à ceux de [18]. Les trajectoires ont été calculées en unités MKS avec m valant la masse de l'électron, $\sigma_0 = 10^{-6}$ m, $Y = 5\sigma_0$ et $k_y = 0$. La distance entre les fentes et l'écran est de 0.2 m. De (3.11), nous pouvons déduire que le temps nécessaire aux particules pour atteindre l'écran ou le détecteur est inversement proportionnel à k_x .

La figure 3.2 montre un certain nombre de trajectoires pour quatre valeurs différentes de k_x . Cela nous permet d'obtenir les deux conditions étudiées plus haut, soit (a) $|\sigma_t| = 1.16\sigma_0$, (b) $|\sigma_t| = 2.52\sigma_0$, (c) $|\sigma_t| = 4.74\sigma_0$ et (d) $|\sigma_t| = 5.88\sigma_0$. La position initiale en y de chaque paire a été choisie au hasard à l'aide de deux distributions gaussiennes avec une déviation standard de σ_0 . L'une des distributions était centrée en Y , et l'autre en $-Y$. Lorsque $|\sigma_t| \approx \sigma_0$, les trajectoires bohmiennes sont presque des lignes horizontales. Cela provient du fait que l'expansion des paquets d'onde est très faible. La situation est très différente en (d), où les effets d'interférence sont assez évidents. Certaines trajectoires mènent des particules émergeant de la fente du haut au-dessous de l'axe des x et vice-versa.

Il est assez difficile de bien voir le comportement des paires de trajectoires à la fi-

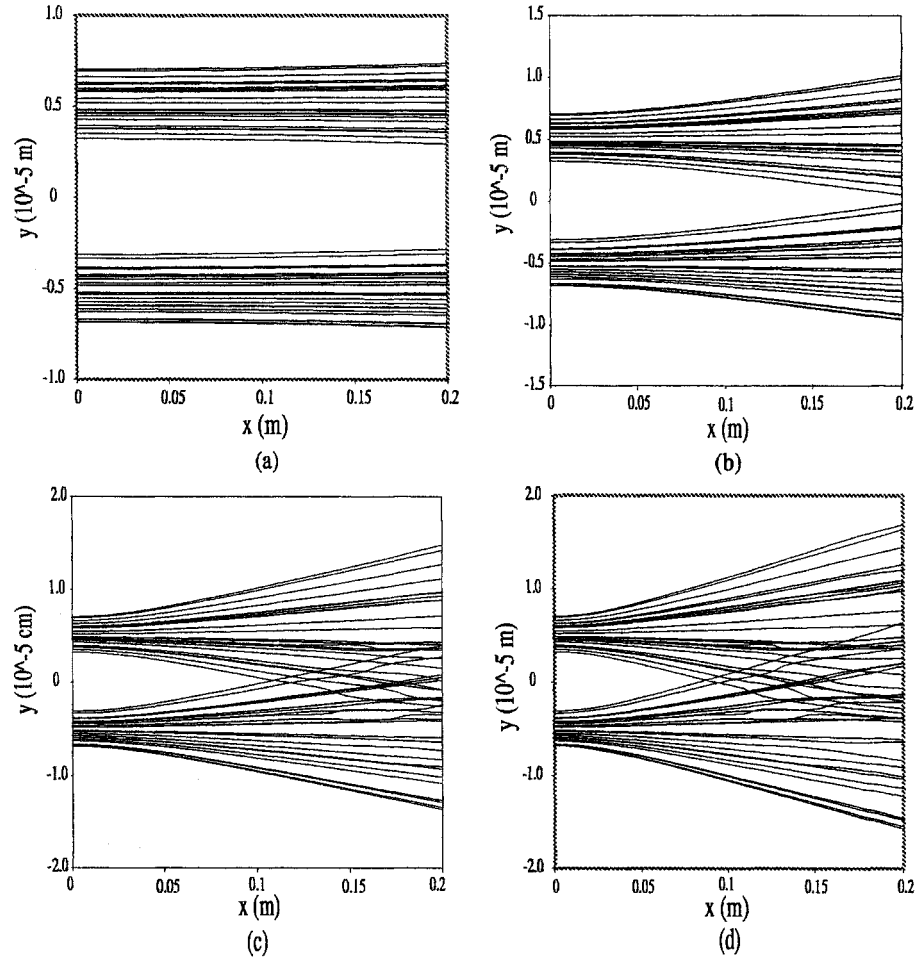


FIG. 3.2 – 25 paires de trajectoires pour (a) $\hbar k_x/m = 2 \times 10^7 \text{ m/s}$, (b) $\hbar k_x/m = 5 \times 10^6 \text{ m/s}$, (c) $\hbar k_x/m = 2.5 \times 10^6 \text{ m/s}$, et (d) $\hbar k_x/m = 2 \times 10^6 \text{ m/s}$.

gure 3.2. C'est pourquoi la figure 3.3 en montre un nombre réduit. En (a), les conditions initiales des positions en y pour deux particules d'une paire ont été choisies symétriquement, c'est-à-dire que $y(0) = 0$. Les trajectoires de ces paires de particules demeurent symétriques, comme il se doit. D'un autre côté, si les positions initiales ne sont pas symétriques, comme en (b), on voit assez rapidement que les trajectoires sont asymétriques. La position initiale selon y utilisée en (b) est $y = Y$ pour la particule empruntant la fente du haut, alors que celle empruntant l'autre fente est choisie selon $y = -Y + 1.5 \sigma_0$ (ligne pleine), $y = -Y$ (ligne pointillée) et $y = -Y - 1.5 \sigma_0$ (ligne hachée et pointillée),

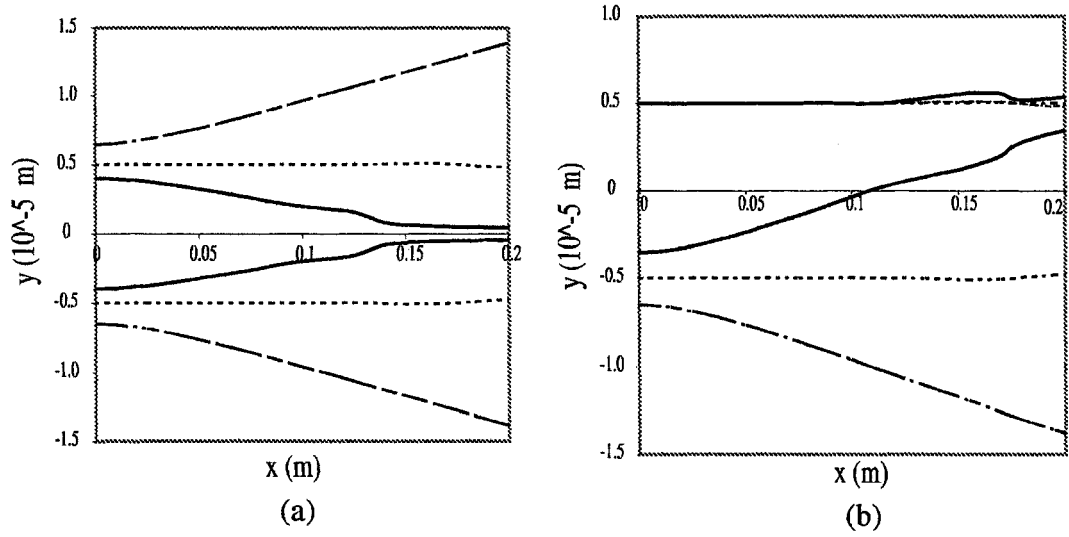


FIG. 3.3 – Trois paires trajectoires avec des conditions initiales (a) symétriques et (b) asymétriques.

respectivement. On voit immédiatement que la particule dont la position initiale est $y = -Y + 1.5\sigma_0$ termine sa course au-dessus de l'axe des x . En poursuivant les calculs pour des temps plus élevés, la particule s'éloigne toujours plus de l'axe des x .

En résumé, nous avons trouvé que le comportement des trajectoires bohmiennes s'accorde parfaitement avec les prédictions des deux interprétations de la mécanique quantique. À toute fin pratique, il n'y a donc pas de différence vérifiable expérimentalement entre les deux interprétations de la mécanique quantique pour l'interférence de deux particules pour les cas étudiés ici.

Chapitre 4

Fonctions d'onde générales

Bien que nous ayons démontré que les interprétations standard et bohmiennes de la mécanique quantique s'accordent sur l'interférence de deux particules lorsque les fonctions d'onde partielles sont semblables à (2.15), il peut subsister un doute quant à leur correspondance dans le cas de fonctions d'onde différentes. Cependant, il est fréquent que le calcul analytique de celle-ci soit très difficile, voire même impossible. Heureusement, il existe plusieurs moyens pour calculer soit les trajectoires bohmiennes, soit la fonction d'onde, ou les deux, dans le cas où seule la fonction d'onde initiale est connue. Il n'est pas nécessaire de rappeler ici l'importance que revêt le développement de méthodes numériques. En fait, presque chaque type de problème possède sa méthode de résolution numérique. Nous avons donc voulu déterminer une technique efficace pour calculer les trajectoires bohmiennes et la fonction d'onde dans le cas de l'interférence d'une seule ou de deux particules.

Il existe deux ensembles d'équations différentielles équivalentes qui peuvent être résolues afin d'obtenir les trajectoires bohmiennes. Il s'agit de résoudre les équations du mouvement de l'interprétation de Bohm, où Q est défini à l'équation (2.10),

$$\frac{\partial \vec{v}_i}{\partial t} + \sum_j (\vec{v}_j \cdot \vec{\nabla}_j) \vec{v}_i = -\frac{1}{m_i} \vec{\nabla}_i (Q + V) \quad (4.1)$$

et

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \vec{\nabla}_i \cdot (P \vec{v}_i) = 0, \quad (4.2)$$

ou encore l'équation de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) \psi. \quad (4.3)$$

Notons que les équations (4.1) et (4.2) s'obtiennent de (4.3) en passant à la représentation polaire de la fonction d'onde (2.1) et en effectuant la transformation $\vec{\nabla}_i S \rightarrow m_i \vec{v}_i$. Les détails concernant cette transformation seront présentés à la section 4.2.1.

Dans le cas des équations du mouvement bohmiennes, il existe deux approches pour leur résolution numérique. La première concerne une méthode dite d'Euler, où une grille fixe est utilisée comme discrétisation de l'espace et du temps. Les équations sont alors discrétisées elles aussi et peuvent alors être résolues numériquement par les techniques habituelles. L'autre choix concerne une méthode dite de Lagrange. Parmi les méthodes numériques que l'on peut classer dans cette catégorie se situent, entre autres, les simulations "particules dans une cellule". Il s'agit principalement de prendre un ensemble de "pseudo-particules" ou de points mobiles. Ces pseudo-particules suivent le comportement qu'auraient de vraies particules dans la même situation. Elles sont donc soumises aux équations du mouvement et suivent les trajectoires bohmiennes. Elles ont ainsi une masse, une position, une quantité de mouvement et, dans le cas présent, transportent la valeur de la distribution de probabilité ainsi que du potentiel quantique évalués à l'endroit où elles se trouvent.

Pour ce qui est de l'équation de Schrödinger, seule une approche eulérienne est possible. Nous avons utilisé un algorithme de Runge-Kutta d'ordre 4 pour la propagation dans le temps.

Ensuite, pour pouvoir procéder à la solution numérique des différentes équations, nous avons besoin d'une méthode d'approximation de dérivées d'ordre 1 et 2. Le choix d'une telle méthode est crucial et de celui-ci peut dépendre l'efficacité de la résolution. Deux options ont été testées. L'une d'elles consiste à faire une approximation des dérivées avec un certain nombre de points. L'autre utilise la méthode généralisée des moindres carrés pour ajuster une série de polynômes sur un voisinage du point où l'évaluation doit être faite. Les coefficients des polynômes nous donnent alors les dérivées

dont nous avons besoin. La dernière méthode peut être utilisée autant sur une grille avec un pas variable qu'un pas constant, alors que la première requiert une grille dont la distance entre les points est constante. Cependant, la méthode généralisée des moindres carrés nécessite l'inversion d'une matrice à chaque évaluation de dérivées. Elle est donc beaucoup plus lente qu'une approximation avec un certain nombre de points. Un avantage indéniable de la méthode généralisée des moindres carrés est sa facilité d'adaptation à un changement du nombre de dimensions, caractéristique que l'autre technique d'approximation est bien loin de posséder.

Nous avons d'abord testé les différentes méthodes qui seront présentées plus loin avec l'interférence d'une seule particule. Ce choix est motivé non seulement par la ressemblance entre les deux phénomènes, mais aussi par le nombre moins élevé de dimensions requises par l'interférence d'une particule.

La détermination d'une méthode numérique efficace dans le cas de l'interférence trouve son importance dans le fait que l'interférence n'est pas un cas simple à traiter numériquement. En effet, dans les cas que nous avons étudiés plus tôt, non seulement les parties réelle et imaginaire de la fonction d'onde oscillent de façon importante, mais la distribution de probabilités P le fait aussi et le comportement du potentiel quantique est loin d'être simple (voir figure 2.3 page 19). On peut donc s'attendre à un comportement similaire même avec d'autres fonctions d'onde initiales que (2.15) à la page 14. Habituellement, on opte pour la méthode hydrodynamique (équations bohmiennes du mouvement) lorsque les parties réelle et imaginaire de la fonction d'onde oscillent trop car, généralement, les quantités physiques utilisées dans les équations bohmiennes du mouvement se comportent mieux. Ici, ce n'est pas le cas. Le choix des équations à résoudre n'est donc pas trivial.

4.1 Calcul des dérivées

La détermination de la méthode d'approximation des dérivées est un point primordial dans la conception d'une technique de résolution numérique. Ici, non seulement la

stabilité de la simulation dépend directement de la méthode, mais en plus l'évolution temporelle des quantités calculées repose sur une bonne évaluation des dérivées.

Il existe de nombreuses méthodes d'approximations de dérivées sur un ensemble de points. Certaines, comme la méthode généralisée des moindres carrés, permettent l'utilisation d'un pas variable entre les points. Elles sont donc bien adaptées pour les simulations de type lagrangien. Cela n'est pas le cas de la deuxième technique que nous avons utilisée. Cette caractéristique joue donc un rôle important dans la sélection de la technique. Trois autres critères entrent en jeu : la stabilité, la rapidité d'exécution et, finalement, la possibilité d'adapter facilement la méthode si l'on souhaite varier le nombre de dimensions. Malheureusement, il est souvent impossible de tout avoir. Ainsi, la méthode généralisée des moindres carrés est plus stable et s'adapte plus facilement que l'autre technique d'approximation, mais son temps d'exécution est beaucoup plus long. Souvent, la méthode d'approximation des dérivées spatiales sera déterminée en fonction des besoins de la technique de résolution et de la justesse de l'évaluation des dérivées.

4.1.1 Méthode généralisée des moindres carrés

Cette technique d'approximation a été utilisée uniquement avec les équations bohmienne du mouvement. Nous savons, par les équations (2.10), (4.1) et (4.2), que nous devons connaître les dérivées spatiales d'ordre 1 de la plupart des quantités et la dérivée d'ordre 2 de P au temps t pour pouvoir mettre à jour les différentes quantités à un temps $t + \Delta t$. Nous devons donc être capables d'obtenir les dérivées jusqu'à l'ordre 2 de toutes les quantités physiques du système. Cela est réalisé à l'aide de la méthode généralisée des moindres carrés.

Le principe de base de cette méthode est assez simple. Il s'agit en fait de trouver, pour un point donné de la grille, un développement en série de polynômes qui minimise l'erreur (selon le χ^2) faite sur les coefficients de ce développement. On ajuste donc les polynômes aux données que nous avons autour du point où la dérivée doit être évaluée.

Cette technique permet l'utilisation, avec un risque beaucoup moins grand que lorsque l'on utilise des polynômes d'interpolation, des coefficients des polynômes pour obtenir les différentes dérivées. Cette technique possède plusieurs avantages, comme celle de permettre l'utilisation d'un pas variable entre les points de la grille. De plus, le passage d'un nombre de dimensions à un nombre supérieur se fait directement, comme nous pourrions le voir plus loin.

Dans les versions plus traditionnelles de la méthode "particule dans une cellule", on utilise une grille sous-jacente aux particules afin de calculer de telles dérivées. Dans notre cas, l'utilisation de la méthode généralisée des moindres carrés nous permet l'abandon de cette grille dans le cas de la méthode lagrangienne, ce qui nous permet alors d'économiser mémoire et temps de calcul. D'ailleurs, il faut se rappeler qu'avec une méthode lagrangienne, les particules se déplacent. Ainsi, l'espace entre les particules varie en fonction du temps. Il faut donc rechercher les voisins les plus proches de chaque particule régulièrement. Nous avons opté pour une façon de faire assez simple. Nous fixons tout d'abord le nombre minimal de voisins que nous voulons pour réaliser l'ajustement de polynômes, ainsi qu'un certain rayon à l'intérieur duquel les voisins devraient se trouver. Chaque point de la grille est ensuite examiné pour savoir s'il se retrouve effectivement dans le rayon de recherche. Si c'est le cas, son indice est conservé. À la fin de cette étape, si le nombre de voisins trouvés à l'intérieur du rayon est supérieur ou égal au nombre minimal requis, alors la recherche est terminée. Si ce n'est pas le cas, alors le rayon est augmenté et la recherche est recommencée. Notons qu'une telle recherche s'adapte très bien à un nombre arbitraire de dimensions.

Examinons donc cette méthode de plus près. Pour ce faire, nous suivrons le développement présenté dans [23]. Nous cherchons une approximation d'une fonction $f(\vec{r})$ en un point \vec{r}_0 . Définissons un ensemble de M polynômes $p_s(\vec{r} - \vec{r}_0)$ avec lequel nous exprimons la fonction $f(\vec{r})$ en série:

$$f(\vec{r}) = \sum_{s=1}^M a_s p_s(\vec{r} - \vec{r}_0). \quad (4.4)$$

Un ensemble de polynômes très approprié pour le calcul simple des dérivées est celui-ci:

$$\{1, \xi, \frac{1}{2}\xi^2, \dots; \eta, \frac{1}{2}\eta^2, \dots; \xi\eta, \dots\}$$

où $\xi = x - x_0$ et $\eta = y - y_0$. Ici, nous avons un problème bidimensionnel. Pour augmenter le nombre de dimensions, il suffit de modifier l'ensemble de polynômes. Avec ces polynômes, les dérivées sont données directement par les coefficients a_s correspondant au polynôme du même ordre. On remarque aisément que la connaissance de tous les coefficients nous permet d'avoir une approximation pour toutes les dérivées spatiales jusqu'à l'ordre du polynôme le plus élevé et ce, pour toutes les dimensions. Même si la fonction $f(\vec{r})$ n'est pas bien représentée par des polynômes d'ordre peu élevé sur tout le domaine simultanément, elle le sera très probablement sur des parties restreintes de son domaine.

Maintenant, pour trouver une expression pour les coefficients a_s au sens des moindres carrés, il est habituel de trouver l'ensemble de coefficients a_s qui minimisera la fonction χ^2 suivante:

$$\chi^2 = \sum_{n=1}^N \left[\frac{f(\vec{r}_n) - \sum_{s=1}^M a_s p_s(\vec{r}_n - \vec{r}_0)}{\sigma_n} \right]^2. \quad (4.5)$$

Afin de simplifier la notation, la matrice \mathbf{A} est introduite, de même que les vecteurs \vec{a} et \vec{b} :

$$A_{ns} = \frac{p_s(\vec{r}_n - \vec{r}_0)}{\sigma_n}, \quad (4.6)$$

$$b_n = \frac{f(\vec{r}_n)}{\sigma_n}, \quad (4.7)$$

où nous avons utilisé la convention selon laquelle les matrices sont écrites en caractère gras et les vecteurs avec une flèche. Les composantes du vecteur \vec{a} sont tout simplement les coefficients qui doivent être déterminés. Notons ici que \mathbf{A} est de dimension $N \times M$ et qu'elle n'est généralement pas carrée, puisque pour faire un ajustement valable d'un polynôme sur un ensemble de données, il faut au moins avoir autant de points qu'il y a de coefficients à déterminer pour connaître le polynôme. Donc, la condition $N \geq M$ doit être respectée.

La solution au problème, soit les valeurs des a_s minimisant (4.5), peut être trouvée en utilisant les équations normales. Afin d'examiner cette méthode, notons tout d'abord que le minimum de χ^2 sera atteint lorsque la dérivée par rapport à tous les coefficients a_s sera nulle.

$$0 = \frac{\partial \chi^2}{\partial a_r} = - \sum_{n=1}^N \frac{2}{\sigma_n^2} \left[f(\vec{r}_n) - \sum_{s=1}^M a_s p_s(\vec{r}_n - \vec{r}_0) \right] p_r(\vec{r}_n - \vec{r}_0) \quad r = 1, \dots, M. \quad (4.8)$$

L'équation précédente se simplifie avec quelques manipulations supplémentaires:

$$\sum_{n=1}^N \frac{f(\vec{r}_n) p_r(\vec{r}_n - \vec{r}_0)}{\sigma_n^2} = \sum_{n=1}^N \sum_{s=1}^M \frac{a_s p_s(\vec{r}_n - \vec{r}_0) p_r(\vec{r}_n - \vec{r}_0)}{\sigma_n^2}, \quad (4.9)$$

ou, tout simplement,

$$\mathbf{A}^T \cdot \vec{b} = \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{a}. \quad (4.10)$$

La dernière équation est appelée l'équation normale. Il est aisé de remarquer que la matrice $\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}$ est toujours carrée. Il est donc possible de solutionner l'équation précédente en inversant $\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}$. Ceci peut être fait, par exemple, avec une élimination de Gauss-Jordan. Une fois la matrice inverse obtenue, il suffit de la multiplier des deux côtés de l'équation, si la technique d'inversion utilisée ne le fait pas automatiquement, pour obtenir une valeur numérique des coefficients a_s , donc des différentes dérivées.

Il existe une autre façon d'obtenir les coefficients du développement en série de $f(\vec{r})$ sans passer par les équations normales. Il s'agit alors d'utiliser la décomposition en valeur singulière. Cette technique est parfois préférable lorsque l'on rencontre des difficultés plus sérieuses avec l'inversion de la matrice. Cela arrive surtout lorsque la matrice $\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}$ se révèle être mal-conditionnée, car l'inversion d'une telle matrice est sujette à des erreurs numériques importantes (voir [23] page 61). Souvent, ce problème peut être résolu en changeant tout simplement d'échelle pour la position. Si cela ne fonctionne pas, il faut alors se tourner vers une méthode plus musclée, comme la décomposition en valeur singulière. Heureusement, l'utilisation des unités atomiques, présentées à la section 2.2, fait que $\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}$ est bien conditionnée, ce qui permet alors l'utilisation des équations normales pour solutionner le problème.

Un des traits intéressants de la solution par les équations normales est que la matrice inverse de $\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}$ est directement reliée aux erreurs standards ou les plus probables des coefficients a_s déterminés. En effet, définissons la matrice \mathbf{C} comme:

$$C_{rs} = (\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A})_{rs}^{-1}. \quad (4.11)$$

En notant que:

$$a_s = \sum_{r=1}^M C_{sr} \left[\sum_{n=1}^N \frac{f(\vec{r}_n) p_r(\vec{r}_n - \vec{r}_0)}{\sigma_n^2} \right], \quad (4.12)$$

on peut montrer [23] que la variance associée avec l'estimation de a_s peut être trouvée à partir de:

$$\sigma^2(a_s) = \sum_{n=1}^N \sigma_n^2 \left(\frac{\partial a_s}{\partial f(\vec{r}_n)} \right)^2. \quad (4.13)$$

En effet, comme la matrice $\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}$ est indépendante des $f(\vec{r}_n)$, alors \mathbf{C} l'est aussi. Donc,

$$\frac{\partial a_s}{\partial f(\vec{r}_n)} = \sum_{r=1}^M \frac{C_{sr} p_r(\vec{r}_n - \vec{r}_0)}{\sigma_n^2}, \quad (4.14)$$

ce qui donne

$$\sigma^2(a_s) = \sum_{r=1}^M \sum_{t=1}^M C_{st} C_{sr} \left[\sum_{n=1}^N \frac{p_r(\vec{r}_n - \vec{r}_0) p_t(\vec{r}_n - \vec{r}_0)}{\sigma_n^2} \right]. \quad (4.15)$$

Comme le terme entre crochets donne exactement la matrice $\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}$, alors l'équation précédente se réduit simplement à

$$\sigma^2(a_s) = C_{ss}. \quad (4.16)$$

Donc, les éléments de la diagonale de \mathbf{C} sont les variances (incertitudes au carré) des paramètres a_s . On peut démontrer que les autres éléments de \mathbf{C} sont les covariances entre deux paramètres différents a_s et a_r .

Une remarque s'impose à propos de l'erreur standard sur les données, soit σ_n . Celle-ci n'est pas toujours aisée à déterminer. La technique proposée par [19, 24] consiste à poser que l'erreur est une fonction gaussienne centrée sur le point où l'on cherche les dérivées et dont la demi-largeur est ajustée afin d'obtenir un poids de 0.1 pour le voisin le plus loin (le choix de cette valeur minimale peut varier en fonction du problème et de l'utilisateur).

4.1.2 Approximation à quelques points

Cette technique est beaucoup plus simple. Il s'agit, à l'aide d'un développement en série de Taylor, de déterminer une approximation pour les dérivées en fonction d'un certain nombre de points. Prenons par exemple, une approximation à deux points pour la dérivée. Celle-ci se détermine aisément en utilisant le fait que, pour un Δ petit:

$$f(x + \Delta) = f(x) + \Delta f'(x) + \frac{\Delta^2}{2} f''(x) + O(\Delta^3), \quad (4.17)$$

$$f(x - \Delta) = f(x) - \Delta f'(x) + \frac{\Delta^2}{2} f''(x) + O(\Delta^3). \quad (4.18)$$

Ainsi,

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta) - f(x - \Delta)}{2\Delta} \quad (4.19)$$

donne une approximation valide à l'ordre de $O(\Delta^2)$. De meilleures approximations peuvent être obtenues de façon similaire. Afin d'effectuer les calculs des différentes dérivées nécessaires aux problèmes, nous avons utilisé les schèmes d'approximation suivants:

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{1}{12\Delta} [8(f(x + \Delta) - f(x - \Delta)) - (f(x + 2\Delta) - f(x - 2\Delta))], \quad (4.20)$$

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \frac{1}{12\Delta^2} [-30f(x) + 16\{f(x + \Delta) + f(x - \Delta)\} - \{f(x + 2\Delta) + f(x - 2\Delta)\}]. \quad (4.21)$$

En notant que Δ est le pas entre chacun des points de la grille et que les points situés en $x \pm \Delta$ sont les voisins immédiats de x , on voit tout de suite la simplicité de la technique. Bien entendu, ces équations ne sont pas valides aux extrémités de la grille. À ces endroits, nous utiliserons plutôt:

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{1}{2\Delta} [-3f(x) + 4f(x + \Delta) - f(x + 2\Delta)], \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \frac{1}{12\Delta^2} [45f(x) - 154f(x + \Delta) + 214f(x + 2\Delta) \\ - 156f(x + 3\Delta) + 61f(x + 4\Delta) - 10f(x + 5\Delta)], \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \frac{1}{12\Delta^2} [& -15f(x) + 10f(x - \Delta) - 4f(x + \Delta) \\ & + 14f(x + 2\Delta) - 6f(x + 3\Delta) + f(x + 4\Delta)]. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Les expressions pour l'approximation des dérivées à l'autre extrémité de la grille peuvent aisément être obtenues en remplaçant $\Delta \rightarrow -\Delta$. Ces approximations sont d'ordre $O(\Delta^4)$ pour l'équation (4.20), $O(\Delta^2)$ pour (4.22) et $O(\Delta^4)$ pour toutes les dérivées d'ordre 2.

Les approximations des dérivées d'ordre 1 sont utilisées uniquement pour le calcul des trajectoires bohmiennes à partir de la fonction d'onde. Comme le calcul de cette dernière est réalisé avec une approche eulérienne, le domaine couvert par la grille est beaucoup plus grand que celui emprunté par les trajectoires. L'équation (4.22) n'est donc pas vraiment utilisée, mais est présente afin d'assurer le fonctionnement du programme. C'est pourquoi elle n'est pas plus précise. L'approximation des dérivées d'ordre 2 servant au calcul de la fonction d'onde est nécessaire partout sur la grille. Il était donc important qu'elle soit très précise même dans les cas limites.

Cette façon d'approximer les dérivées est avantageuse, notamment par sa rapidité d'exécution et sa simplicité. De plus, il est aisé de modifier la méthode dans le but d'améliorer l'ordre de l'approximation.

On remarque assez aisément que cette méthode d'évaluation ne permet que le calcul d'une dérivée selon une seule coordonnée. Ainsi, pour obtenir le gradient ou le laplacien d'une quantité, il faut répéter l'opération pour chaque dimension. Étant donné la simplicité et aussi la rapidité d'exécution de cette méthode (il n'y a pas de matrice à inverser ici...), cette caractéristique ne constitue pas vraiment un problème si le nombre de dimensions ne varie pas trop.

Pour s'appliquer, cette méthode requiert absolument que la distance entre les points de la grille, Δ , soit constante. Ainsi, il sera impossible de l'utiliser dans une simulation de type lagrangien.

4.2 Méthodes de résolution numérique

4.2.1 Équations bohmiennes du mouvement

Afin de calculer les trajectoires bohmiennes dans le cas où la fonction d'onde est inconnue, quoi de mieux que d'utiliser les équations de base de l'interprétation de Bohm! Afin d'obtenir les équations du mouvement qui seront calculées numériquement, les équations (2.8) et (2.9) à la page 10 doivent être réécrites en fonction de la vitesse du système \vec{v} . Cela s'effectue sans peine avec l'équation (2.11). L'équation (2.9) se transforme directement. Pour ce qui est de (2.8), appliquons un gradient par la gauche aux deux côtés de l'équation et divisons le tout par m_i :

$$\frac{1}{m_i} \frac{\partial \vec{\nabla}_i S}{\partial t} + \frac{1}{m_i} \vec{\nabla}_i \left\{ \sum_{j=1}^n \frac{(\vec{\nabla}_j S)^2}{2m_j} \right\} = -\frac{1}{m_i} \vec{\nabla}_i (Q + V). \quad (4.25)$$

Désignons par a et b les numéros des composantes spatiales des vecteurs. La composante a du second terme du membre de gauche se transforme comme

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_i} \frac{\partial}{\partial x_{ia}} \left\{ \sum_{j=1}^n \frac{1}{2m_j} \sum_b \left(\frac{\partial S}{\partial x_{jb}} \right)^2 \right\} &= \sum_{j=1}^n \frac{1}{2m_i m_j} \frac{\partial}{\partial x_{ia}} \sum_b \left(\frac{\partial S}{\partial x_{jb}} \right)^2 \\ &= \sum_{j=1}^n \frac{1}{m_i m_j} \sum_b \left(\frac{\partial S}{\partial x_{jb}} \right) \frac{\partial}{\partial x_{ia}} \left(\frac{\partial S}{\partial x_{jb}} \right) \\ &= \sum_{j=1}^n \frac{1}{m_i m_j} \sum_b \left(\frac{\partial S}{\partial x_{jb}} \right) \frac{\partial}{\partial x_{jb}} \left(\frac{\partial S}{\partial x_{ia}} \right) \\ &= \sum_{j=1}^n \sum_b v_{jb} \frac{\partial}{\partial x_{jb}} v_{ia} \\ &= \sum_{j=1}^n (\vec{v}_j \cdot \vec{\nabla}_j) v_{ia}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

L'équation (4.25) se ramène donc à

$$\frac{\partial \vec{v}_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^n (\vec{v}_j \cdot \vec{\nabla}_j) \vec{v}_i = -\frac{1}{m_i} \vec{\nabla}_i (Q + V). \quad (4.27)$$

Le groupe suivant d'équations devra donc être résolu numériquement:

$$\frac{D\vec{r}_i}{Dt} = \vec{v}_i(t), \quad (4.28)$$

$$\frac{D\vec{v}_i}{Dt} = -\frac{1}{m_i}\vec{\nabla}_i(Q + V), \quad (4.29)$$

$$\frac{DP}{Dt} = -P(t) \sum_j \vec{\nabla}_j \cdot \vec{v}_j(t), \quad (4.30)$$

où nous avons utilisé la dérivée lagrangienne, soit:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_j \vec{v}_j(t) \cdot \vec{\nabla}_j. \quad (4.31)$$

La dérivée lagrangienne est définie comme étant la dérivée temporelle par rapport à un système de coordonnées mobile ou encore le taux de variation en fonction du temps pour un élément de fluide.

Point de vue de Lagrange

La technique de type langrangien que nous avons essayée a été proposée dans l'article de Lopreore et Wyatt [19]. Cette méthode ne s'applique qu'aux équations du mouvement de la mécanique quantique bohmiennne. Elle est basée sur une méthode "particule dans une cellule". Cela consiste à définir un ensemble de particules qui constituera une grille mobile. Chacune de ces particules transporte avec elle ses propriétés, ce qui signifie dans le cas présent sa position, sa vitesse, le potentiel quantique et la distribution de probabilité au point où elle est située. Le potentiel quantique, quant à lui, est donné par l'équation (2.10). L'avantage principal d'une méthode de Lagrange est que la dérivée lagrangienne doit être utilisée comme la dérivée temporelle totale, donc,

$$\frac{Df(t)}{Dt} \rightarrow \frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t}. \quad (4.32)$$

Comme les équations (2.10), (4.28), (4.29) et (4.30) doivent être résolues numériquement, nous devons les discrétiser, selon l'équation (4.32). Comme nous nous intéressons à des particules identiques, toutes les masses m_i sont égales. Un ensemble de N points de la grille est ensuite défini. Étant donné la forme vectorielle des diverses équations à résoudre, il est possible de définir un point de la grille comme étant dans l'espace de configuration. Chacun des points représentera donc un système quantique complet. Cela simplifie la notation, car on peut laisser tomber l'indice i de chaque particule. Ainsi,

dans le cas de l'interférence de deux particules, un seul point de la grille représentera une paire de particules. Une position (\vec{r}_n), une vitesse et une distribution de probabilité P initiales seront ensuite données à chaque point de la grille. Les différentes propriétés de chaque point n seront donc mises à jour à chaque étape de temps, selon les équations suivantes:

$$\vec{r}_n(t + \Delta t) \equiv \vec{r}_n(t) + \Delta t \vec{v}_n(t), \quad (4.33)$$

$$\vec{v}_n(t + \Delta t) \equiv \vec{v}(\vec{r}_n, t + \Delta t) = \vec{v}_n(t) - \frac{\Delta t}{m} \vec{\nabla} (Q_n + V(\vec{r}_n)), \quad (4.34)$$

$$P_n(t + \Delta t) \equiv P(\vec{r}_n, t + \Delta t) = P_n(t) (1 - \Delta t \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_n(t)), \quad (4.35)$$

$$Q_n(t + \Delta t) = Q(\vec{r}_n, t + \Delta t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 P_n^{1/2}(t + \Delta t)}{P_n^{1/2}(t + \Delta t)}. \quad (4.36)$$

Notons que l'expression $\vec{\nabla} f_n$ signifie que le gradient est évalué au point \vec{r}_n .

Maintenant, nous devons faire quelques petites modifications à l'équation (4.35). Comme le terme $\Delta t \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_n(t)$ est très petit, nous pouvons faire l'approximation suivante:

$$P(t + \Delta t) = P(t) (1 - \Delta t \vec{\nabla} \cdot \vec{v}(t)) \approx P(t) \exp(-\Delta t \vec{\nabla} \cdot \vec{v}(t)). \quad (4.37)$$

De plus, tel que proposé dans [24], posons:

$$P \equiv R^2 = e^{2g}. \quad (4.38)$$

Ainsi,

$$Q_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R_n}{R_n} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left((\vec{\nabla} g_n)^2 + \nabla^2 g_n \right) \quad (4.39)$$

$$g_n(t + \Delta t) = g_n(t) - \frac{1}{2} \Delta t \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_n. \quad (4.40)$$

Généralement, la fonction g aura des dérivées plus douces que P , ce qui facilite le calcul des dérivées.

Les équations (4.33), (4.34), (4.36) et (4.40) constituent donc l'ensemble des équations qu'il faudra résoudre numériquement pour obtenir les trajectoires bohmiennes. Quelques remarques sur ces équations sont appropriées. Tout d'abord, des valeurs initiales seront nécessaires pour la position, la vitesse et la distribution de probabilité.

Début du programme*Initialiser les différentes valeurs de vitesse, de position et de la fonction g* *Boucler de t_i à t_f par étapes de Δt* *Boucler sur i pour tous les points**Calcul de la dérivée de la fonction g au temps t* *Mettre à jour la valeur du potentiel quantique au temps t selon (4.39)**Fin Boucle**Boucler sur i pour tous les points**Mettre à jour la valeur de la position au temps $t + \Delta t$ selon (4.33)**Calcul de la dérivée première de la vitesse et du potentiel quantique
au temps t* *Mettre à jour la valeur de la fonction g au temps $t + \Delta t$ selon (4.40)**Mettre à jour la valeur de la vitesse au temps $t + \Delta t$ selon (4.34)**Fin Boucle**Fin Boucle**Écriture des résultats dans des fichiers***Fin du programme**

Tab. 4.1 – *Algorithme du programme résolvant les équations bohmiennes du mouvement avec une approche de Lagrange.*

De plus, contrairement aux autres valeurs, le potentiel quantique doit être entièrement recalculé à chaque étape de temps.

Résoudre numériquement les équations du mouvement par une méthode utilisant le point de vue de Lagrange possède bien des avantages. Nous pouvons déjà remarquer que certains termes impliquant des dérivées ne sont pas explicitement présents dans les équations, cela diminue donc les erreurs numériques qui interviennent inévitablement dans tout calcul de ce genre. De plus, cela diminue aussi le temps de calcul. Un autre avantage non négligeable de cette méthode est le fait que les particules forment en quelque sorte la grille qui sert pour résoudre les équations différentielles. Mais, en quoi

Calcul des dérivées de la fonction $f(x)$ *Détermination d'au moins Nb voisins du point i* *Initialisation des matrices A et A^T* *Initialisation de \vec{b} avec les valeurs de $f(x)$ pour les voisins de la particule i* *Inversion de $A^T \cdot A$* *Multiplication $(A^T \cdot A)^{-1} \cdot (A^T \cdot \vec{b}) = \vec{a}$* **Fin du calcul des dérivées**

Tab. 4.2 – Détails du calcul des dérivées pour l'algorithme présenté à la table 4.1. Les valeurs des coefficients du développement en série de polynômes (4.4) se retrouvent dans le vecteur \vec{a} et peuvent être utilisés facilement dans le reste du programme.

cela constitue-t-il un avantage vis-à-vis l'utilisation d'une grille fixe? Eh bien, tout simplement parce que la grille étant mobile, elle s'adaptera au problème. Ainsi, les particules se dirigeront vers les zones où la distribution de probabilité est élevée, là où plus de précision est généralement nécessaire. Il ne sera pas non plus nécessaire de trouver à l'avance un domaine qui englobera l'espace suffisant au problème. Cela permet donc de diminuer la mémoire de l'ordinateur qui est nécessaire. Or, comme les points de la grille se déplacent, celle-ci ne conserve pas la même forme tout au long de la simulation. Cela complique donc les choses lorsque l'on doit évaluer les différentes dérivées. C'est pourquoi la méthode généralisée des moindres carrés est utilisée.

Cette méthode a déjà prouvée son efficacité, notamment dans le cas d'une barrière de potentiel de Eckart [19, 25, 26], et quelques autres cas [24, 27, 28]. L'algorithme du programme conçu pour cette méthode de résolution est présenté aux tables 4.1 et 4.2.

Point de vue d'Euler

Nous avons aussi considéré un modèle où la grille est fixe. Le passage de la méthode précédente à celle-ci est simple. Tout d'abord, la position des points de la grille est fixe, donc il n'est plus nécessaire de la mettre à jour. Ensuite, comme le repère n'est plus

Début du programme*Initialiser les différentes valeurs de vitesse, de position et de la fonction g* *Boucler sur i pour tous les points de la grille**Détermination d'au moins N_b voisins de la particule i* *Initialisation des matrices \mathbf{A} et \mathbf{A}^T* *Initialisation de \vec{b} avec les valeurs de $f(x)$ pour les voisins de la particule i* *Inversion de $\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}$* *Fin Boucle**Boucler de t_i à t_f par étapes de Δt* *Boucler sur i pour tous les points de la grille**Calcul de la dérivée de la fonction g au temps t* *Mettre à jour la valeur du potentiel quantique au temps t selon (4.39)**Fin Boucle**Boucler sur i pour tous les points de la grille**Calcul de la dérivée première de la vitesse et du potentiel quantique
au temps t* *Mettre à jour la valeur de la fonction g au temps $t + \Delta t$ selon (4.41)**Mettre à jour la valeur de la vitesse au temps $t + \Delta t$ selon (4.42)**Fin Boucle**Fin Boucle**Écriture des résultats dans des fichiers***Fin du programme**

Tab. 4.3 – Algorithme du programme conçu pour résoudre les équations bohmiennes du mouvement avec l'approche d'Euler.

mobile, il faut renoncer à l'utilisation de la dérivée lagrangienne comme étant la dérivée totale par rapport au temps. Il y a donc plus de termes et de dérivées à calculer. Les équations pour g et pour la vitesse doivent donc être modifiées. Elles seront remplacées par les suivantes:

$$g_n(t + \Delta t) = g_n(t) - \frac{1}{2}\Delta t \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_n - \Delta t \vec{\nabla} g_n \cdot \vec{v}_n \quad (4.41)$$

$$\vec{v}_n(t + \Delta t) = \vec{v}_n(t) - \frac{\Delta t}{m} \vec{\nabla}(Q_n + V_n) - \Delta t(\vec{v}_n(t) \cdot \vec{\nabla})\vec{v}_n(t). \quad (4.42)$$

Bien entendu, l'équation (4.33) ne sera plus utilisée. Cette méthode ne nous permet donc pas de calculer directement les trajectoires bohmiennes. Heureusement, lorsque l'on connaît les valeurs de la vitesse en fonction du temps, le calcul des trajectoires est très simple.

Ici, comme la grille est fixe, un point de celle-ci possède toujours les mêmes voisins. Il est donc possible de faire le calcul de la matrice $(\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A})^{-1}$ au début du programme et ce, pour toutes les particules. On conserve donc cette matrice et on la réutilise plus loin dans le programme. Cela accélère le calcul. Il est à noter cependant que les matrices \mathbf{A} et \mathbf{A}^T ne sont pas conservées et devront être réinitialisées lors du calcul des dérivées. L'algorithme du programme est présenté aux tables 4.3 et 4.4.

Calcul des dérivées de la fonction $f(\mathbf{x})$

Initialisation des matrices \mathbf{A} et \mathbf{A}^T

Initialisation de \vec{b} avec les valeurs de $f(x)$ pour les voisins de la particule i

Multiplication $(\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A})^{-1} \cdot (\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{B}) = \vec{a}$

Fin du calcul des dérivées

Tab. 4.4 – Détails du calcul des dérivées pour l'algorithme présenté à la table 4.3.

4.2.2 Propagation de l'équation de Schrödinger

Cette façon de procéder est fondamentalement différente de celle présentée plus haut, et beaucoup plus simple. Au lieu de calculer les trajectoires directement, nous avons procédé plutôt en cherchant à obtenir la propagation dans le temps de la fonction d'onde. Avec les résultats ainsi obtenus, nous pourrions ensuite calculer les trajectoires bohmiennes. La méthode est assez simple. Il s'agit tout d'abord d'utiliser l'équation de Schrödinger pour une particule libre, soit, en une dimension,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (4.43)$$

Ensuite, pour des raisons de simplicité, nous travaillons toujours en unités atomiques, qui sont décrites à la section 2.2. L'équation précédente se simplifie donc comme suit,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (4.44)$$

Décomposons maintenant la fonction d'onde ψ en ses parties réelle et imaginaire comme:

$$\psi = \psi_R + i\psi_I. \quad (4.45)$$

En remplaçant cette forme dans l'équation (4.43), nous obtenons:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \{\psi_R + i\psi_I\} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \{\psi_R + i\psi_I\}, \quad (4.46)$$

où ψ_R et ψ_I sont des fonctions réelles. Il est donc possible, ensuite, de séparer les parties réelle et imaginaire de l'équation précédente, donc:

$$\frac{\partial \psi_R}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi_I}{\partial x^2}, \quad (4.47)$$

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi_R}{\partial x^2}. \quad (4.48)$$

Il aurait aussi été possible d'utiliser la forme polaire de la fonction d'onde au lieu de celle qui vient d'être proposée. Les équations à résoudre seraient alors les équations (2.4) et (2.5) à la page 10. Or, la résolution de ces équations requerrait le calcul de plus de dérivées que les deux équations précédentes. Il faudrait alors s'attendre à ce qu'il y ait plus d'erreurs numériques dans ce cas. Le choix de la forme (4.45) est donc plus approprié.

Maintenant, voyons de quelle façon nous allons résoudre numériquement ces équations. Commençons par discrétiser l'espace et le temps comme:

$$x \rightarrow x_n = n\Delta \quad -N \leq n \leq N \quad (4.49)$$

$$t \rightarrow t_a = a\delta \quad 0 \leq a \leq A \quad (4.50)$$

$$\psi_R \rightarrow \psi_{Rna} = \psi_R(x_n, t_a) \quad (4.51)$$

$$\psi_I \rightarrow \psi_{I na} = \psi_I(x_n, t_a) \quad (4.52)$$

où le domaine de l'espace s'étend de $-N\Delta$ à $N\Delta$ et celui du temps de 0 à $A\delta$. Par la suite, il faut définir les approximations que nous allons utiliser pour résoudre les équations différentielles. Pour la dérivée d'ordre 2 par rapport à x , nous allons utiliser l'équation (4.21) à l'intérieur de la grille. Cela donne

$$\left(\frac{\partial^2 \psi_R}{\partial x^2}\right)_n = F_n(\psi_{Rm}) = \frac{1}{12\Delta^2} \left[-30\psi_{Rn} + 16(\psi_{R(n+1)} + \psi_{R(n-1)}) \right. \\ \left. - (\psi_{R(n+2)} + \psi_{R(n-2)}) \right], \quad (4.53)$$

où $n \neq \pm N$ et $n \neq \pm(N-1)$. L'indice a est négligé ici, car les valeurs utilisées sont toutes évaluées au même temps t_a . Pour les extrémités, nous utiliserons plutôt:

$$F_N(\psi_{Rm}) = \frac{1}{12\Delta^2} \left[45\psi_{RN} - 154\psi_{R(N-1)} + 214\psi_{R(N-2)} \right. \\ \left. - 156\psi_{R(N-3)} + 61\psi_{R(N-4)} - 10\psi_{R(N-5)} \right], \quad (4.54)$$

$$F_{(-N)}(\psi_{Rm}) = \frac{1}{\Delta^2} \left[45\psi_{R(-N)} - 154\psi_{R(-N+1)} + 214\psi_{R(-N+2)} \right. \\ \left. - 156\psi_{R(-N+3)} + 61\psi_{R(-N+4)} - 10\psi_{R(-N+5)} \right], \quad (4.55)$$

$$F_{(N-1)}(\psi_{Rm}) = \frac{1}{12\Delta^2} \left[-15\psi_{R(N-1)} + 10\psi_{R(N)} \right. \\ \left. - 4\psi_{R(N-2)} + 14\psi_{R(N-3)} - 6\psi_{R(N-4)} + \psi_{R(N-5)} \right], \quad (4.56)$$

$$F_{(-N+1)}(\psi_{Rm}) = \frac{1}{12\Delta^2} \left[-15\psi_{R(-N+1)} + 10\psi_{R(-N)} \right. \\ \left. - 4\psi_{R(-N+2)} + 14\psi_{R(-N+3)} - 6\psi_{R(-N+4)} + \psi_{R(-N+5)} \right], \quad (4.57)$$

ce qui correspond aux approximations (4.23) et (4.24). On trouve des équations semblables pour la dérivée seconde de ψ_I .

Les dérivées par rapport au temps seront résolues numériquement en utilisant la méthode de Runge-Kutta d'ordre quatre pour des équations différentielles couplées. En remplaçant dans (4.47) et (4.48) les formes discrétisées des dérivées spatiales, on peut écrire

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_{Rn} = -\frac{1}{2} F_n(\psi_{Im}), \quad (4.58)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_{In} = \frac{1}{2} F_n(\psi_{Rm}). \quad (4.59)$$

Ceci constitue un système de $2(2N + 1)$ équations différentielles couplées du premier ordre, avec une seule variable indépendante. Posons maintenant

$$\begin{aligned}
 k_{Rn}^{(1)} &= -\frac{1}{2}F_n(\psi_{Im}) & k_{In}^{(1)} &= \frac{1}{2}F_n(\psi_{Rm}) \\
 k_{Rn}^{(2)} &= -\frac{1}{2}F_n\left(\psi_{Im} + \frac{\delta}{2}k_{Im}^{(1)}\right) & k_{In}^{(2)} &= \frac{1}{2}F_n\left(\psi_{Rm} + \frac{\delta}{2}k_{Rm}^{(1)}\right) \\
 k_{Rn}^{(3)} &= -\frac{1}{2}F_n\left(\psi_{Im} + \frac{\delta}{2}k_{Im}^{(2)}\right) & k_{In}^{(3)} &= \frac{1}{2}F_n\left(\psi_{Rm} + \frac{\delta}{2}k_{Rm}^{(2)}\right) \\
 k_{Rn}^{(4)} &= -\frac{1}{2}F_n(\psi_{Im} + \delta k_{Im}^{(3)}) & k_{In}^{(4)} &= \frac{1}{2}F_n(\psi_{Rm} + \delta k_{Rm}^{(3)}).
 \end{aligned} \tag{4.60}$$

L'algorithme de Runge-Kutta d'ordre quatre s'écrit alors comme

$$\psi_{Rn(a+1)} = \psi_{Rna} + \frac{\delta}{6} \left(k_{Rn}^{(1)} + 2k_{Rn}^{(2)} + 2k_{Rn}^{(3)} + k_{Rn}^{(4)} \right), \tag{4.61}$$

$$\psi_{In(a+1)} = \psi_{Ina} + \frac{\delta}{6} \left(k_{In}^{(1)} + 2k_{In}^{(2)} + 2k_{In}^{(3)} + k_{In}^{(4)} \right), \tag{4.62}$$

où, dans les membres de droite, toutes les fonctions k sont évaluées à l'instant t_a .

Ces développements peuvent être utilisés pour calculer la propagation d'une fonction d'onde en une dimension, comme dans le cas étudié plus tôt de l'interférence d'une seule particule.

L'interférence de deux particules telle que nous l'avons étudiée plus haut étant un problème bidimensionnel, nous avons besoin d'expressions similaires aux précédentes pour le système d'équations différentielles couplées suivant:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \psi_R}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \psi_I}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \psi_I}{\partial y_2^2} \right), \\
 \frac{\partial \psi_I}{\partial t} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \psi_R}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \psi_R}{\partial y_2^2} \right).
 \end{aligned} \tag{4.63}$$

La façon la plus simple de procéder consiste à discrétiser l'espace selon y_1 et y_2 comme nous l'avons fait plus haut selon x , voir équation (4.49). Ensuite, on doit remplacer les indices n et m par des paires d'indices faisant référence à la position en y_1 et celle en y_2 . Les fonctions F_n seront modifiées pour pouvoir ajouter la dérivée numérique d'ordre 2 selon y_2 à celle selon y_1 qui remplace alors x . Le nombre de fonctions discrètes $\psi_{R(mn)}$ et $\psi_{I(mn)}$ sera donc augmenté considérablement, de même que celui des fonctions $F_{(mn)}$, $k_{R(mn)}^{(i)}$ et $k_{I(mn)}^{(i)}$.

L'algorithme du programme réalisé à partir de la méthode décrite dans cette section est présenté à la table 4.5. Les dérivées sont obtenues selon les équations (4.53) à (4.57).

Une fois les résultats obtenus pour les parties réelle et imaginaire de la fonction d'onde, il faut encore calculer les trajectoires bohmiennes. Cette étape est réalisée en utilisant l'équation (2.11) de la page 10 et en se rappelant que:

$$S = \hbar \arctan \left[\frac{\psi_I}{\psi_R} \right]. \quad (4.64)$$

Début du programme

Initialiser les différentes valeurs de position, de parties réelle et imaginaire

Boucler de t_i à t_f par étapes de Δt

Boucler sur i pour tous les points de la grille

Calcul de $k^{(1)}$ pour ψ_R et ψ_I selon (4.60)

Fin Boucle

Boucler sur i pour tous les points de la grille

Calcul de $k^{(2)}$ pour ψ_R et ψ_I selon (4.60)

Fin Boucle

Boucler sur i pour tous les points de la grille

Calcul de $k^{(3)}$ pour ψ_R et ψ_I selon (4.60)

Fin Boucle

Boucler sur i pour tous les points de la grille

Calcul de $k^{(4)}$ pour ψ_R et ψ_I selon (4.60)

Mise à jour de ψ_R et ψ_I selon (4.60)

Fin Boucle

Fin Boucle

Écriture des résultats dans des fichiers

Fin du programme

Tab. 4.5 – Algorithme du programme résolvant l'équation de Schrödinger.

Une attention particulière doit être portée à l'évaluation de S . En effet, l'évaluation numérique de l'arctangente est généralement limitée à sa branche principale. Ainsi, bien que la fonction S ne soit pas bornée, son évaluation numérique à partir des valeurs de ψ_R et ψ_I le sera. On verra donc la fonction S passer d'un chiffre proche de $\pi/2$ ou π , selon la façon dont est traitée l'arctangente par l'ordinateur, à un chiffre près de $-\pi/2$ ou $-\pi$, ou vice-versa. Afin de régler ce problème, nous avons opté pour une méthode plutôt manuelle. Lorsque qu'un saut dû à l'évaluation de l'arctangente est détecté, un facteur de π ou 2π est ajouté ou enlevé aux autres valeurs afin d'obtenir une fonction continue dont le minimum ou le maximum est situé à $y = 0$. La symétrie du problème ainsi que de la forme analytique de S ont aidé à trouver la solution à ce problème.

Les trajectoires sont calculées en utilisant l'équation suivante pour leur propagation:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t \vec{v}(t). \quad (4.65)$$

Bien entendu, il n'est vraiment pas rare qu'une trajectoire passe entre les points de la grille. Pour obtenir la valeur de la vitesse en ce point, il est suffisant de faire une moyenne pondérée de la vitesse à partir de sa valeur aux points avoisinant la trajectoire.

4.3 Résultats

Afin de tester les méthodes de résolution numérique que nous venons de proposer pour l'interférence d'une seule et de deux particules, nous avons besoin d'un cas où la fonction d'onde et les trajectoires bohmiennes sont connues analytiquement. Nous avons donc naturellement opté pour les cas que nous connaissions, soit ceux où les fonctions d'onde partielles sont données par l'équation (2.15) à la page 14. Les valeurs numériques utilisées sont donc celles de la section 2.2. Ces valeurs sont aussi utilisées pour l'interférence de deux particules, bien que les résultats présentés au chapitre 3 soient calculés en unités MKS.

4.3.1 Équations bohmiennes du mouvement

Nous avons tout d'abord testé les approches de Lagrange et d'Euler avec un paquet gaussien, dont les trajectoires sont connues analytiquement. Dans les deux cas, les résultats obtenus concordent presque parfaitement avec les résultats théoriques. Ensuite, nous avons reproduit les résultats de Lopreore et Wyatt [19] dans le cas d'une barrière de potentiel de Eckart en utilisant l'approche de Lagrange. Une fois ces tests de validation effectués, nous étions prêts à passer à l'étape suivante: l'interférence.

Nous risquons d'avoir des problèmes avec la technique lagrangienne, à cause de la présence de noeuds, qui sont ici les minimums d'interférence. Effectivement, plusieurs articles [24, 29] parlent de difficultés similaires. La raison avancée pour l'existence de ce problème est qu'étant donné que les trajectoires se regroupent dans les régions où la probabilité de retrouver une particule est plus élevée, il n'y a généralement pas beaucoup de trajectoires qui se situent en un temps t à l'intérieur d'un noeud. Il n'y a qu'à se référer à la figure 2.4 à la page 20 pour comprendre cela. Or, le potentiel quantique varie rapidement à un noeud (pensez ici aux vallées de la figure 2.3 à la page 19), ce qui fait qu'une précision importante (beaucoup de points) est nécessaire pour bien représenter les variations de Q . Malheureusement, ce critère n'est pas respecté. Ainsi, avec une méthode lagrangienne, il n'y a pas beaucoup de précision dans les régions où il en faudrait le plus. Un exemple assez frappant de ce problème est que lorsque l'on effectue une simulation numérique pour l'interférence d'une seule particule, il est possible que l'on passe complètement à côté du phénomène. En effet, si l'on place des points de la grille uniquement dans les endroits où la probabilité initiale est assez élevée, il ne devrait pas y en avoir autour de $y = 0$. Or, lorsque l'on effectue une simulation avec seulement ces positions initiales, les franges du patron d'interférence ne sont pas développées: les trajectoires et le potentiel quantique montrent plutôt deux paquets d'onde de type gaussien qui semblent indépendants.

Cette situation est unique à la mécanique quantique bohmiennne. Ainsi, en mécanique des fluides, où l'on utilise aussi cette méthode de résolution, un tel problème ne survient

pas. Les régions où une précision importante est requise se situent principalement dans les régions de densité plus forte. Donc, la méthode lagrangienne est très bien adaptée pour les besoins de la mécanique des fluides. Il ne faut toutefois pas oublier qu'il existe des problèmes en mécanique quantique où il n'y a pas de noeuds. Prenons par exemple le cas de la barrière de Eckart étudié dans [19]. Très peu de points et d'étapes de temps sont alors nécessaires pour obtenir des résultats intéressants. L'approche lagrangienne montre alors toute son efficacité.

Plusieurs solutions ont été avancées pour régler ce manque de précision [29, 30, 31, 32], notamment l'adaptation (ajout de points au cours de la simulation) [33], ou encore l'utilisation de méthodes hybrides où l'on solutionne l'équation de Schrödinger aux noeuds [34]. Toutefois, comme la présence de noeuds n'est pas temporaire dans l'interférence, l'adaptation était hors de question : elle se serait révélée être trop coûteuse en temps de calcul et en mémoire. D'autre part, tant qu'à utiliser la méthode hybride, pourquoi ne pas solutionner uniquement l'équation de Schrödinger et calculer les trajectoires bohmiennes par la suite ? D'autres propositions se sont révélées être beaucoup plus complexes. Pourquoi alors ne pas tout simplement fixer la grille ? Bien que les avantages de la méthode lagrangienne soient perdus, il n'est resté pas moins que cela réglerait le problème des noeuds.

Avant de passer à la méthode eulérienne, nous avons tenté d'ajouter des points entre les deux fentes avec la méthode lagrangienne. Le but recherché était simple : régler le problème initial des noeuds en ajoutant des points là où les oscillations dans le potentiel quantique prennent naissance. Peut-être cela serait-il suffisant pour obtenir de bons résultats. Cependant, les résultats obtenus n'étaient pas ceux attendus. Les figures 4.1 et 4.2 montrent la comparaison entre les valeurs théoriques et celles obtenues.

De plus, après de nombreux essais avec la méthode eulérienne, la constatation suivante dut être faite : cette approche ne produit pas non plus de résultats en accord avec la théorie. La cause de la différence entre les valeurs obtenues et théoriques est la même pour l'approche lagrangienne et celle d'Euler. La seule conclusion possible est que ce problème ne provient pas directement des noeuds. Il se situe plutôt au niveau

de l'approximation servant à déterminer les différentes dérivées autour de $y = 0$. Par exemple, initialement, le potentiel quantique obtenu autour de $y = 0$, i.e. entre les deux fentes, peut afficher toutes sortes de formes, tout dépendant du degré le plus élevé des polynômes d'interpolation ou encore du nombre de points de la grille. Ce résultat est montré à la figure 4.1.

Cela aurait très bien pu ne pas être critique. Malheureusement, le développement des creux et des plateaux dans le potentiel quantique commence dans cette région. De plus, comme la vitesse selon y est nulle initialement, le calcul du gradient du potentiel quantique dans les premières étapes de la simulation est important. Le changement du nombre de voisins ou encore l'ajout de polynômes d'ordre plus élevé dans l'interpolation n'ont fait que donner lieu à des comportements du potentiel quantique et de la vitesse des particules assez différents les uns des autres. En augmentant vraiment le nombre de points dans la grille, on voit, à la figure 4.1(b) que l'approximation du potentiel quantique s'est améliorée. Nous savons que la distribution de probabilité, dans la région de $y = 0$, est bien représentée par un polynôme de degré 5 sur de petites portions de la courbe. Or, dans cette simulation, nous avons utilisé au moins deux fois le nombre minimal de points, ce qui signifie 12 points et plus lorsque nous utilisons des polynômes jusqu'au degré 5 à ajuster aux données. Ainsi, si l'écart entre les points n'est pas suffisamment petit, le domaine couvert par les points utilisés peut être trop grand pour que la représentation de la distribution de probabilité (fonction g) obtenue soit valide, ou du moins bonne.

Le cas est encore plus évident pour la vitesse. En effet, pendant un intervalle de temps $0 < t \leq 0.01$ a.u., la forme de la courbe de la vitesse théorique est très semblable à celle à $t = 0.01$ a.u. montrée à la figure 4.2. On comprend assez rapidement que si le nombre de points n'est pas suffisant, il sera impossible d'avoir une représentation juste de la vitesse, que ce soit en termes de polynômes d'ordre 2, 3, ou même 5. Par ailleurs, plus on augmente le degré du polynôme, plus le domaine nécessaire pour avoir une bonne représentation est grand, et donc plus on doit avoir de points.

Les figures 4.1 et 4.2 montrent certains résultats obtenus avec la méthode lagran-

gienne. Comme il a été expliqué plus haut, nous avons d'abord commencé avec l'interférence d'une particule. La fonction d'onde globale ainsi que les valeurs numériques utilisées sont celles de la section 2.2. Dans tous les cas, le temps va de $t = 0$ à $t = 0.01$ a.u. en 1000 étapes de temps et les particules sont situées entre -4 et 4 a.u.. Nous avons ensuite fait varier le nombre de points et le nombre de voisins utilisés pour ajuster les polynômes¹. Comme on peut le remarquer, les comportements se rapprochent de la théorie lorsque l'on augmente le nombre de points. Près de $y = 0$, mieux vaut ne pas trop augmenter le nombre de voisins utilisés pour le calcul des dérivées.

Bien que des résultats ne soient pas présentés pour la méthode eulérienne, ceux présentés à la figure 4.1 provenant de la méthode lagrangienne sont les mêmes pour les deux méthodes. Même si les résultats finaux ne sont pas identiques avec les deux méthodes, il n'en reste pas moins que la méthode eulérienne ne permet pas d'obtenir un comportement plus près de la théorie.

Finalement, la méthode lagrangienne s'est révélée être au départ inefficace à cause des noeuds. Même l'obtention de résultats intéressants avant la formation des minimums n'aurait pas permis de sauver cette approche. En effet, lors de l'apparition des minimums d'interférence, les informations concernant le potentiel quantique près de ces derniers auraient été perdues, cela étant dû au problème de précision dont il a été question plus haut. Or, même en ajoutant des points entre les deux fentes, les résultats initiaux ne sont pas ceux attendus. Le problème est situé au niveau du fait que le nombre de points nécessaire au bon fonctionnement de la méthode d'approximation des dérivées est beaucoup trop grand pour que la méthode reste efficace. Ce problème se rencontre aussi avec la méthode eulérienne.

Une façon de résoudre le dernier problème serait d'utiliser une approximation à quelques points, telle que celle présentée précédemment, au lieu de la méthode généralisée des moindres carrés. Cela nous restreindrait non seulement à la méthode eulérienne, mais aussi à un pas fixe entre les points de la grille. Malgré tout, cette approche pourrait

1. Ici, les figures ne montrent qu'une partie du domaine, soit de -1 à 1 a.u.. En dehors de cet intervalle, le comportement obtenu est conforme à celui attendu.

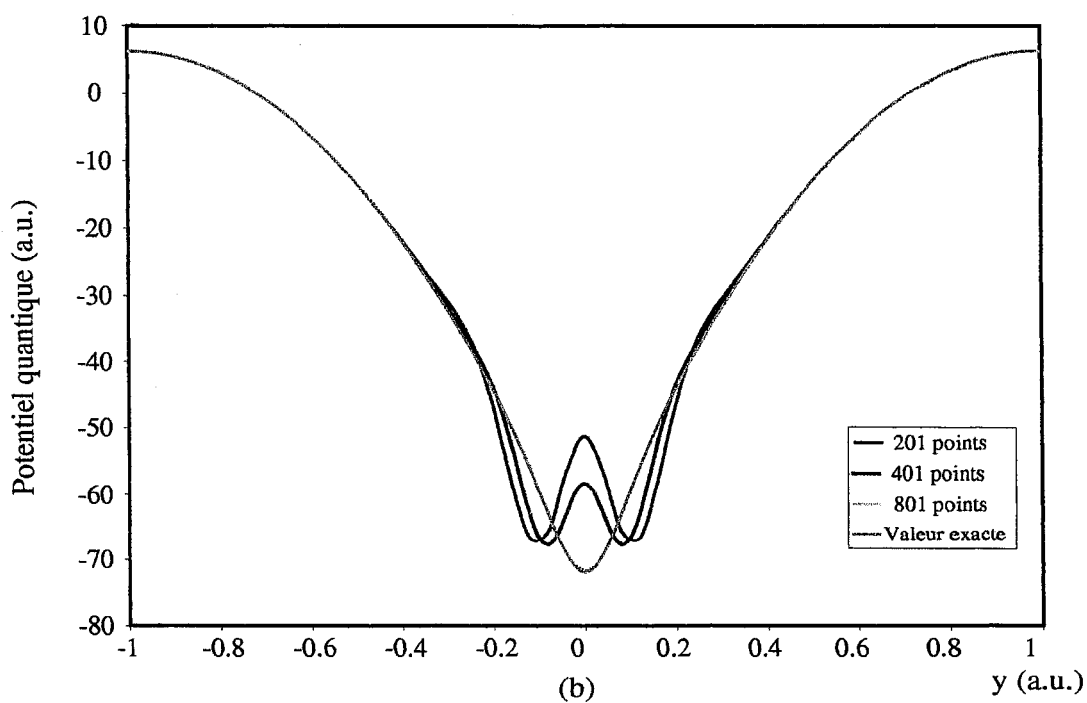
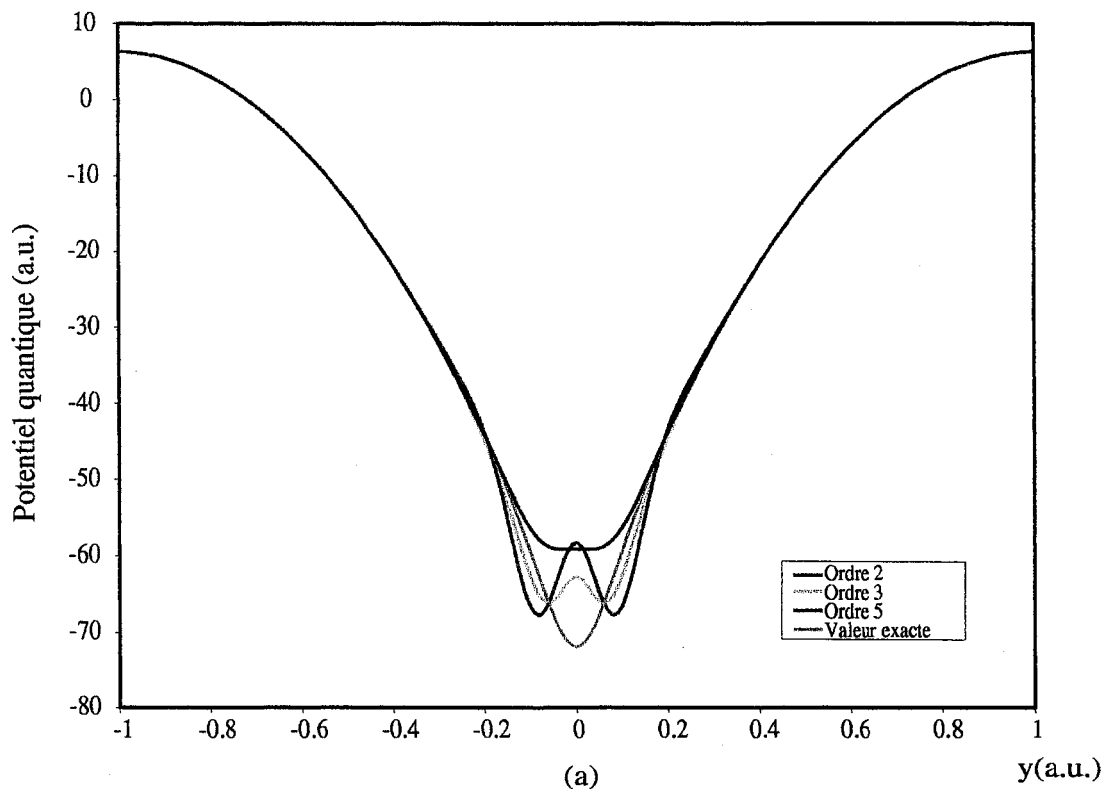


FIG. 4.1 – *Potentiel quantique initial, (a) 12 voisins, 410 points utilisés, l'ordre le plus élevé des polynômes est varié, (b) 12 voisins, polynômes jusqu'à l'ordre 5 utilisés et le nombres de points est varié.*

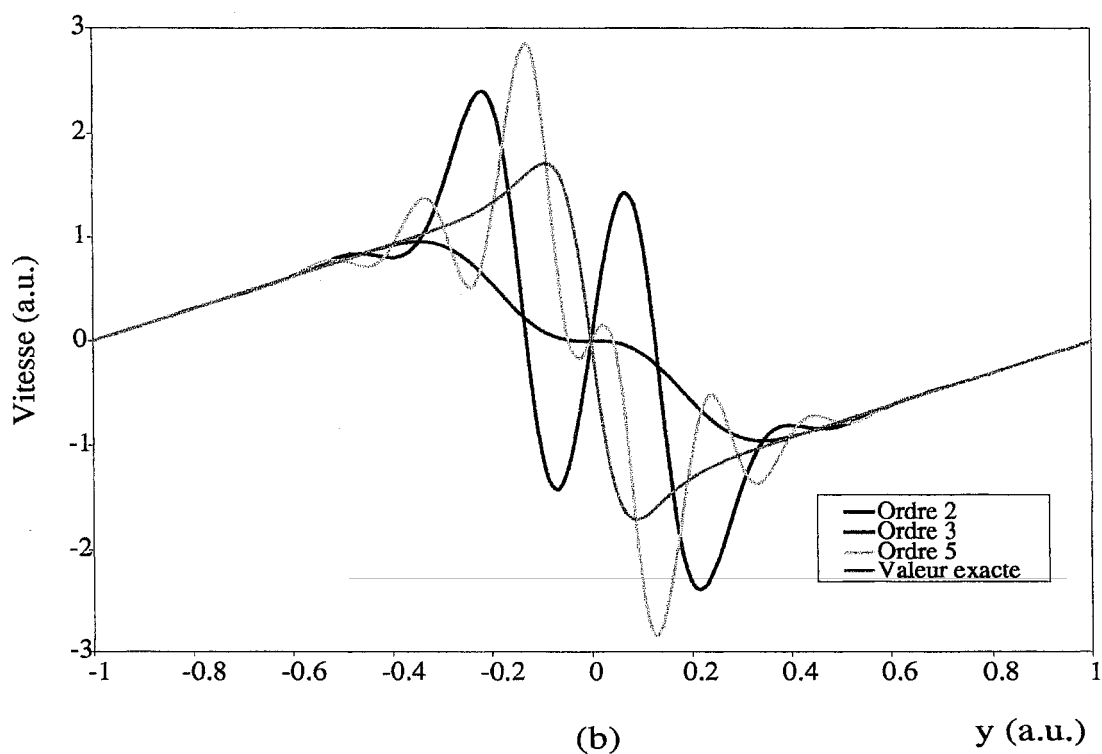
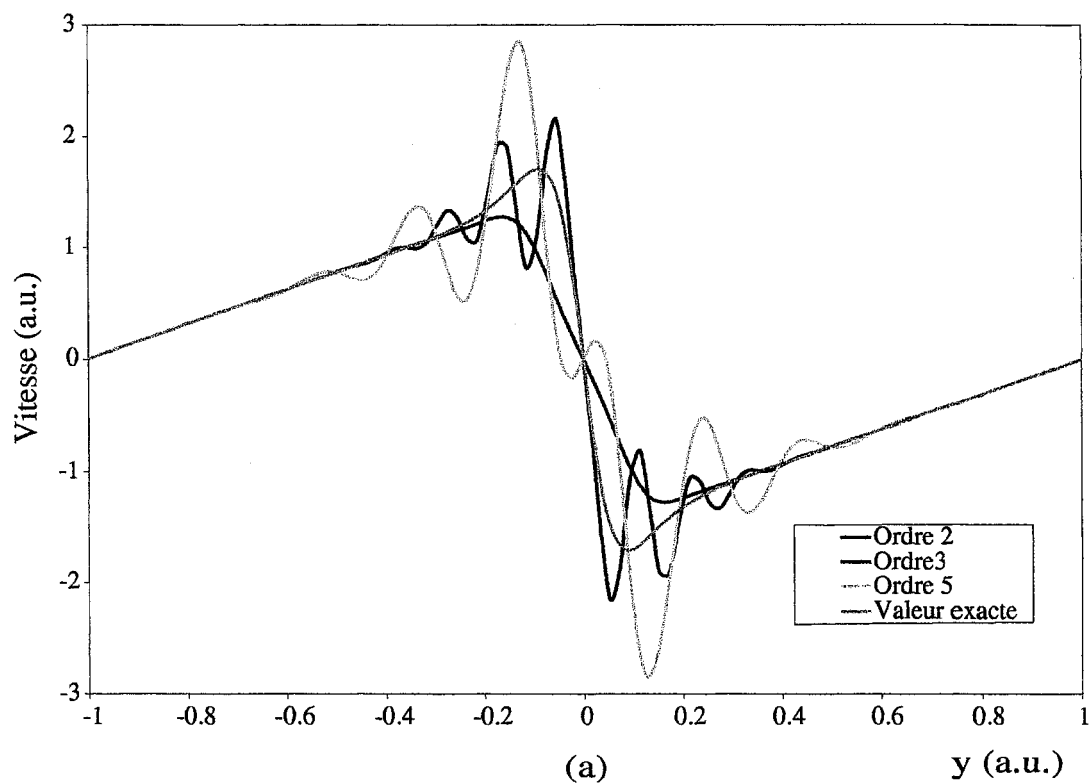


FIG. 4.2 – . Vitesse au temps $t = 0.01$ a.u. avec 401 points, le degré des polynômes est varié (a) 2 fois le nombre minimum de voisins requis, (b) 12 voisins.

se révéler plus rapide et plus précise, même si sa stabilité risque d'être moindre.

La conclusion que l'on peut tirer de tout ceci est simple: dans les deux cas, l'efficacité de la méthode est très discutable. Non seulement il faudrait plus de 100 000 étapes de temps pour arriver à atteindre le temps final $t = 1$ a.u., mais en plus le nombre de points nécessaires doit être supérieur à 801. Avec l'utilisation de polynômes de degré 5, les temps de calcul deviennent trop longs (plusieurs heures)², surtout à cause des inversions de matrice. Et nous n'en sommes pas encore à rajouter une dimension pour calculer les trajectoires bohmiennes pour l'interférence de deux particules...

4.3.2 Propagation de l'équation de Schrödinger

Pour tester l'efficacité de cette méthode pour l'interférence d'une seule particule, nous avons utilisé les valeurs numériques décrites plus haut à la section 2.2.

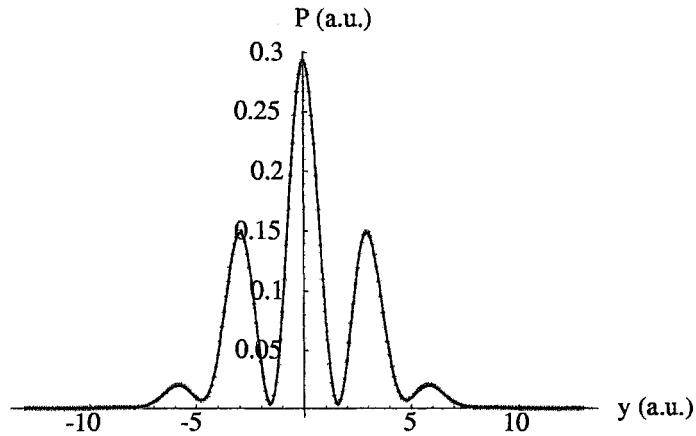
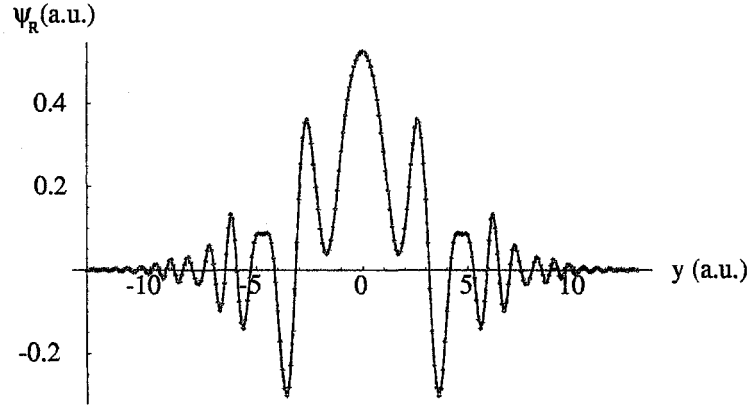
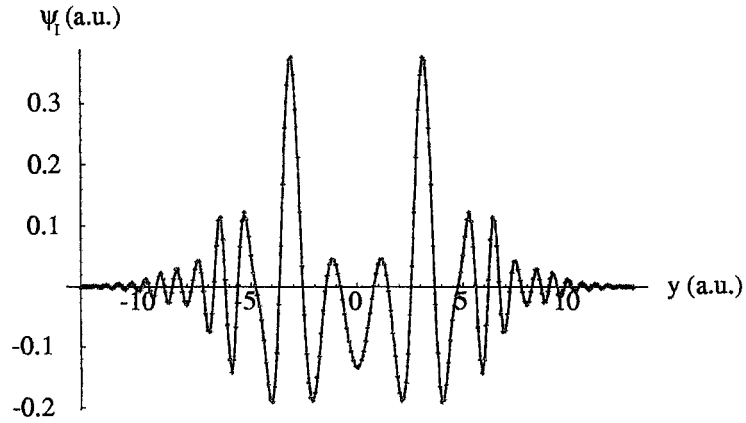


FIG. 4.3 – *Distribution de probabilité au temps $t = 1$.*

Les figures (4.3), (4.4) et (4.5) montrent les résultats obtenus avec cette méthode. Le nombre de points utilisés est de 261, s'étalant uniformément sur un domaine allant de -13 a.u. à 13 a.u.. Le temps a été discrétisé en 15 000 étapes allant de $t = 0$ a.u. à $t = 1$ a.u.. Les points représentent les valeurs obtenues et la ligne pleine la valeur théorique à obtenir. La correspondance entre les deux est très satisfaisante.

2. L'ordinateur utilisé pour faire les calculs possède un processeur Pentium 4M 1.8 GHz d'Intel.

FIG. 4.4 – *Partie réelle de la fonction d'onde au temps $t = 1$.*FIG. 4.5 – *Partie imaginaire de la fonction d'onde au temps $t = 1$.*

Ensuite, à partir de ces résultats, il ne reste plus qu'à calculer les trajectoires bohmienne. Cette étape est assez simple et les résultats obtenus, montrés à la figure 4.6 correspondent bel et bien aux résultats théoriques montrés à la figure 2.4.

La figure 4.7 montre un ensemble plus restreint de trajectoires, en noir, prises dans la figure 4.6. À celles-ci sont superposées les trajectoires théoriques calculées provenant de la figure 2.4, en rouge. On voit que la correspondance entre les deux résultats est très bonne. Il existe toutefois un écart entre les deux séries de valeurs lorsque les trajectoires subissent une courbure lors de leur passage à travers un minimum d'interférence. Toutefois, cet écart est minime.

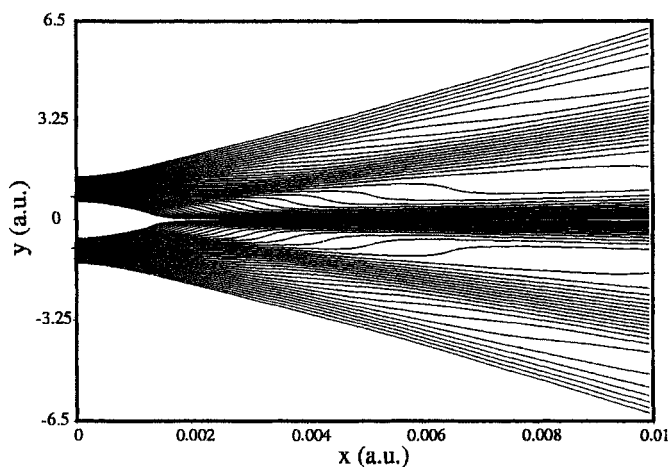


FIG. 4.6 – 82 trajectoires pour l'interférence d'une seule particule. Les positions initiales sont distribuées uniformément de -1.4 à -0.6 a.u. et de 0.6 à 1.4 a.u..

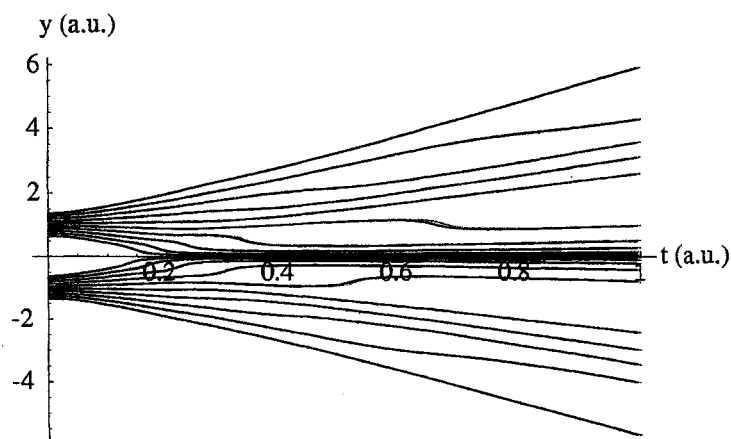


FIG. 4.7 – Quelques-unes des trajectoires prises à la figure 4.6 (ligne noire) et leurs valeurs théoriques (ligne rouge).

Pour l'interférence d'une seule particule, cette méthode s'est révélée très efficace. Non seulement les résultats correspondent très bien avec les valeurs théoriques, mais les calculs sont très rapides et ne nécessitent pas beaucoup de points, ni d'étapes de temps (comparativement à l'autre approche). La supériorité de cette méthode vis-à-vis l'approche passant par les équations du mouvement de l'interprétation de Bohm

présentée plus haut dans le cas de l'interférence ne laisse aucun doute.

L'étape suivante consiste tout naturellement à effectuer le même travail pour l'interférence de deux particules. Malheureusement, les programmes ayant servi pour l'interférence d'une seule particule doivent être remaniés: il y manque une dimension. La possibilité d'adaptation de cette méthode à de nouveaux problèmes demandant un nombre différent de dimensions n'est donc pas très bonne. Cependant, comme elle fonctionne bien, le travail en vaut la peine.

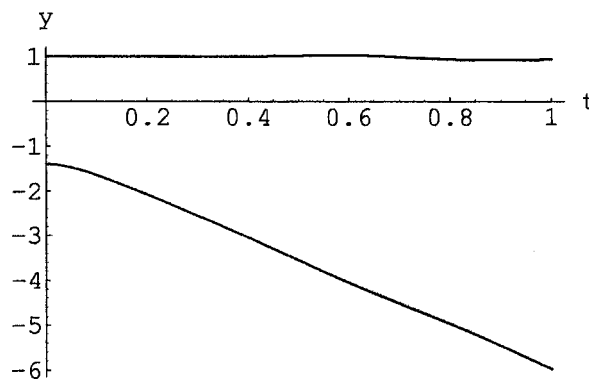


FIG. 4.8 – Trajectoire d'une paire de particules avec comme position initiale $y_1=1$ et $y_2=-1.4$ a.u.. Les résultats théoriques sont tracés en rouge et ceux obtenus en noir. Les échelles sont en unités atomiques.

Les figures 4.8 et 4.9 montrent certaines trajectoires obtenues en calculant d'abord les parties réelle et imaginaire de la fonction d'onde. Les conditions initiales correspondent au cas étudié au chapitre 3, donc aux fonctions d'onde partielles des équations (2.15) et (2.17) et à la fonction d'onde globale (3.1). Cependant, les valeurs numériques utilisées sont celles pour l'interférence d'une seule particule (page 18). 15 000 étapes de temps ont été nécessaires pour calculer la fonction d'onde, et le même nombre a été utilisé pour le calcul des trajectoires. Une grille de 261×261 points a servi pour résoudre les équations. On voit aisément qu'à la figure 4.8, la trajectoire obtenue pour la paire de particules correspond très bien à sa valeur théorique. À la figure 4.9, il y a une certaine différence entre le comportement obtenu et celui attendu. La raison de ce fait est que

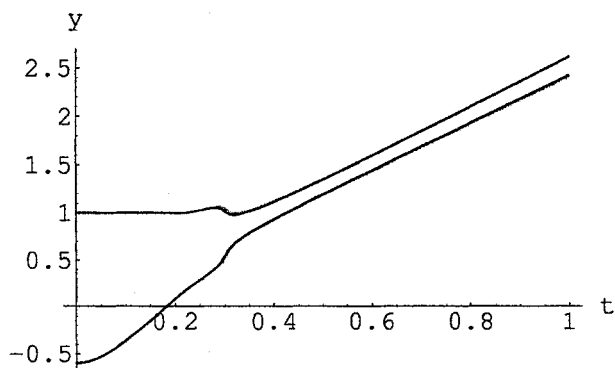


FIG. 4.9 – Trajectoire d'une paire de particules avec comme position initiale $y_1=1$ et $y_2=-0.6$ a.u.. Les résultats théoriques sont tracés en rouge et ceux obtenus en noir. Les échelles sont en unités atomiques.

la paire de particules passe par un noeud, ce qui rend plus ardue l'intégration de la vitesse en fonction du temps. Quoi qu'il en soit, le but recherché est atteint: malgré cette différence, une approximation très acceptable des trajectoires est obtenue.

Il est à noter ici que la coïncidence entre les valeurs des parties réelle et imaginaire calculées et leur valeur théorique est aussi bonne qu'avec l'interférence d'une seule particule.

Autant dans le cas de l'interférence d'une seule particule que dans celui de l'interférence de deux particules, la différence entre les valeurs théoriques et celles obtenues est probablement due en partie à l'approximation de la dérivée de S qui pourrait être plus précise.

4.4 Discussion

Nous venons donc de voir que l'obtention de la fonction d'onde et des trajectoires bohmiennes pour l'interférence d'une seule ou de deux particules n'est pas une chose simple. Bien qu'une approche lagrangienne basée sur les équations bohmiennes du mouvement soit prometteuse, elle s'est révélée inappropriée dans le cas de l'interférence. La

présence de noeuds empêche de conserver une précision intéressante dans les régions où elle serait nécessaire. Opter alors pour une méthode eulérienne basée toujours sur les mêmes équations n'a pas apporté plus de résultats. La principale cause de ceci est la méthode d'approximation des dérivées qui nécessite un nombre trop grand de points sur la grille ainsi qu'un temps trop élevé d'exécution pour que la résolution soit vraiment efficace. Une façon différente d'évaluer les dérivées réglerait peut-être ce problème. Toutefois, étant donné la sensibilité de la simulation aux valeurs du potentiel quantique, il est probable qu'un nombre élevé de points soit toujours nécessaire.

Heureusement, une approche basée sur la résolution numérique de l'équation de Schrödinger a donné de bons résultats avec un nombre restreint de points, même si le domaine couvert est beaucoup plus important qu'avec une méthode de Lagrange. Les parties réelle et imaginaire de la fonction d'onde ainsi que les trajectoires bohmiennes obtenues correspondent très bien aux résultats théoriques et ce, pour les deux types d'interférence. Malgré le fait qu'un nombre important d'étapes de temps est nécessaire à l'obtention de bons résultats, la rapidité d'exécution des calculs compense largement ce fait.

Plusieurs raisons peuvent pousser quelqu'un à utiliser les équations bohmiennes du mouvement au lieu de l'équation de Schrödinger. La plus importante reste toutefois la possibilité d'utiliser une approche lagrangienne. Demandant à la fois moins de points sur la grille et enlevant certains termes dans les équations différentielles, cette approche a aussi le charme de pouvoir s'adapter très facilement aux problèmes multidimensionnels. Toutefois, la présence de noeuds lui ôte une bonne partie de son efficacité. Pour ceux qui ne cherchent pas à obtenir les trajectoires bohmiennes, cette approche perd alors tout intérêt. Malgré tout, comme les problèmes de mécanique quantique ne présentent pas tous des noeuds, une telle approche peut donc se révéler utile très souvent.

Donc, dans un cas où la distribution de probabilité P et le potentiel quantique Q varient beaucoup, nous pouvons conclure qu'il est préférable de résoudre l'équation de Schrödinger puis de calculer les trajectoires bohmiennes, plutôt que d'utiliser les équations du mouvement de l'interprétation de Bohm.

Chapitre 5

Conclusion

L'interprétation de Bohm résout certes la plupart des problèmes que l'on rencontre en mécanique quantique standard. Toutefois, elle n'est pas exempte de difficultés. Notons par exemple la non-localité du potentiel quantique et l'absence, jusqu'à présent, d'une version relativiste bien acceptée de cette interprétation. On peut lui reprocher aussi de ne pas prédire des phénomènes inconnus ou qui la distingueraient de l'interprétation standard. Bien que quelques propositions d'expériences qui devaient permettre de déterminer laquelle des deux interprétations est la bonne aient été faites, aucune ne s'est révélée fondée.

C'est le cas notamment avec l'interférence de deux particules. Nous avons pu montrer que l'hypothèse à la base de la proposition de ces expériences était erronée et que les deux interprétations s'accordent en fait sur le phénomène. De plus, en calculant les trajectoires bohmiennes pour ce type d'interférence, nous avons démontré que leur comportement correspond avec les prédictions faites par les deux interprétations.

Par la suite, nous avons voulu trouver une méthode efficace pour calculer la fonction d'onde et les trajectoires bohmiennes pour l'interférence de deux particules lorsque la fonction d'onde n'est pas connue. Deux approches ont été tentées: l'une basée directement sur les trajectoires bohmiennes et les équations de base de l'interprétation de Bohm, alors que l'autre l'est sur le calcul de la fonction d'onde à partir de l'équation de Schrödinger. Les premiers essais ont été réalisés pour l'interférence d'une particule,

qui est plus simple, avec les fonctions d'onde présentées au chapitre 2 et 3, afin d'avoir un point de comparaison pour les résultats obtenus.

Étant donné la présence de noeuds, il n'est pas approprié d'utiliser une grille mobile pour résoudre les équations du mouvement de Bohm. Les trajectoires se dirigeant vers les zones de probabilité plus élevée, l'absence de points de la grille autour des noeuds cause un manque de précision dans les régions où le potentiel quantique varie beaucoup. De plus, la méthode généralisée des moindres carrés ne s'est pas révélée efficace pour l'approximation des dérivées. Or, la solution est très sensible au calcul des différentes dérivées. La nécessité d'un grand nombre de points sur une grille fixe pour obtenir une approximation intéressante des dérivées d'ordre 1 et 2 rend inefficace la méthode basée sur les équations bohmiennes du mouvement, que ce soit avec une grille fixe ou mobile. Toutefois, il n'est pas exclu qu'une technique différente d'approximation des dérivées permette l'obtention de résultats acceptables avec les équations bohmiennes du mouvement.

Résoudre numériquement l'équation de Schrödinger pour les parties réelle et imaginaire de la fonction d'onde s'est avéré être beaucoup plus approprié avec une approximation à cinq ou six points pour les dérivées spatiales d'ordre 2. De très bons résultats ont été obtenus avec un nombre restreints de points, que ce soit pour l'interférence d'une seule ou de deux particules identiques. Bien que le nombre d'étapes de temps nécessaires soit élevé malgré l'utilisation de la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4, les temps de calculs sont raisonnables. D'ailleurs, une meilleure méthode d'approximation des dérivées permettrait sans doute de diminuer le nombre d'étapes de temps.

Par son approche différente, chaque interprétation de la mécanique quantique nous permet de comprendre, ou du moins de visualiser, un peu mieux les phénomènes à l'échelle microscopique. Ainsi, que l'interprétation de Bohm soit ou non une représentation correcte de la réalité, elle nous apporte tout de même une manière simple par laquelle les phénomènes mystérieux de la mécanique quantique peuvent être expliqués.

Bibliographie

- [1] Einstein, A., Podolsky, B. et Rosen, N., *Phys. Rev.* **45**, 777–780 (1935)
- [2] Bohr, N., *Phys. Rev.* **48**, 696–702 (1935)
- [3] Bell, J. S., *Physics* **1**, 195 (1964)
- [4] Aspect, A., Grangier, P. et Roger, G., *Phys. Rev. Lett.* **47**, 460–463 (1981)
- [5] Aspect, A., Grangier, P. et Roger, G., *Phys. Rev. Lett.* **49**, 91–94 (1982)
- [6] Aspect, A., Dalibard, J. et Roger, G., *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1804–1807 (1982)
- [7] Marchildon, L., *Mécanique quantique*, De Boeck Université, Bruxelles (2000)
- [8] Jarrett, J. P., *Noûs* **18**, 569–589 (1984)
- [9] Bohm, D., *Phys. Rev.* **85**, 166–193 (1952)
- [10] Feynman, R., *La nature de la physique*, Éditions du Seuil, Paris (1980)
- [11] Ghose, P., Incompatibility of the de Broglie-Bohm theory with quantum mechanics
Preprint quant-ph/0001024 (2000)
Ghose, P., On the Incompatibility of Standard Quantum Mechanics and the de
Broglie-Bohm Theory *Preprint* quant-ph/0103126
- [12] Golshani, M. et Akhavan, O., *J. Phys. A : Math. Gen.* **34**, 5259–68 (2001)
- [13] Golshani, M. et Akhavan, O., A two-slit experiment which distinguishes between
the standard and Bohmian quantum mechanics *Preprint* quant-ph/0009040 (2000)
- [14] Golshani, M. et Akhavan, O., Experiment can decide between the standard and
Bohmian quantum mechanics *Preprint* quant-ph/0103100 (2001)
- [15] Brida, G., Cagliero, E., Falzetta, G., Genovese, M., Gramegna, M. et Novero, C.,
J. Phys. B : Optics **35**, 4751–56 (2002)

- [16] Struyve, W., De Baere, W., De Neve, J. et De Weirde, S., *J. Phys. A : Math. Gen.* **36**, 1525–1530 (2003)
- [17] Marchildon, L., *J. Modern Optics*, **50**, 873–879 (2003)
Marchildon, L., On Bohmian trajectories in two-particle interference devices *Preprint* quant-ph/0101132 (2001)
- [18] Guay, E. et Marchildon, L. *J. Phys. A : Math. Gen.* **36**, 5617–5624 (2003)
- [19] Lopreore, C. L. et Wyatt, R. E., *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5190–5193 (1999)
- [20] Feynman, R., Leighton, R. et Sands, M., *The Feynman Lectures on Physics*, Addison-Wesley Publishing Compagny, New York (1966)
- [21] Philippidis, C., Dewdney, C. et Hiley, B. J., *Il Nuovo Cimento* **52**, N.1, 15–28 (1979)
- [22] Holland, P. R., *The Quantum Theory of Motion*, Cambridge University Press, Cambridge (1993)
- [23] Press, W. H., Flannery, B. P. et Teukolsky, S. A., *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, Cambridge (1992)
- [24] Bittner, E., Quantum tunneling dynamics using hydrodynamic trajectories *Preprint* quant-ph/0001119 (2000)
- [25] Glenn Brook, R., Oppenheimer, P. E., Weatherford, C. A., Banicescu, I. et Zhu, J., *Int. J. Quant. Chem.* **85**, 263–271 (2001)
- [26] Glenn Brook, R., Oppenheimer, P. E., Weatherford, C.A., Banicescu, I. et Zhu, J., *J. Mol. Struct. (Theochem)* **592**, 69–77 (2002)
- [27] Lopreore, C. L. et Wyatt, R. E., *Chem. Phys. Lett.* **325**, 73–78 (2000)
- [28] Wyatt, R. E., *J. Chem. Phys.* **111**, 4406–4413 (1999)
- [29] Trahan, C. J., Hughes, K. et Wyatt, R. E., *J. Chem. Phys.* **118**, 9911–9914 (2003)
- [30] Wyatt, R. E., *Chem. Phys. Lett.* **313**, 189–197 (1999)
- [31] Wyatt, R. E., Kouri, D. J. et Hoffman, D. K., *J. Chem. Phys.* **112**, 10730–10737 (2000)
- [32] Wyatt, R. E., et Bittner, E. R. *J. Chem. Phys.* **113**, 8898–8907 (2000)

- [33] Bittner, E. R. et Wyatt, R. E., *J. Chem. Phys.* **113**, 8888–8897 (2000)
- [34] Wyatt, R. E., *J. Chem. Phys.* **117**, 9569–9573 (2002)